



Tesis de Maestría Titulada:

“Regulación de Reactores Químicos con Esquema de Control Proporcional Integral No Lineal”

PRESENTADA POR:
Jesús Fausto López Manzanarez
Ingeniero Químico

ASESOR:
Dr. José de Jesús Álvarez Ramírez

Departamento de Ingeniería de Procesos e Hidráulica
División de Ciencias Básicas e Ingeniería
Universidad Autónoma Metropolitana – Iztapalapa
Av. Michoacán y Purísima S/n, Col. Vicentina, C.P. 09340
Cd. de México, D. F., México

2003

Esta tesis es dedicada a
Fausto y Gloria,
mis amados padres
que no solo me dieron la vida,
sino una formación.

Resumen

El objetivo de la presente tesis es abordar el problema de la regulación de reactores químicos continuos por medio de un esquema de control proporcional integral no lineal (NPI). La motivación para realizar esta investigación surgió a partir de la lectura realizada del trabajo de *Armstrong, Neevel, y Kusik* (2001), la anterior investigación fue realizada en sistemas mecánicos, el esquema de control utilizado presenta un mejor desempeño que el esquema de control proporcional integral lineal (PI), esto porque reduce el tiempo de control y los valores máximos y mínimos del error relativo en comparación con el esquema PI. Lo que en este trabajo se hace es regular dos reactores químicos, un reactor continuo de tanque agitado (CSTR) y un reactor de lecho fluidizado (FBR), la dinámica de estos reactores está descrita por sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden y la aproximación numérica que se utiliza para resolver estos sistemas es la de Runge Kutta de cuarto orden. Uno de los primeros análisis que se realizan es el cálculo de los puntos de equilibrio de los dos reactores y el análisis de estabilidad de esos puntos de equilibrio, pero a pesar de que estos cálculos son indispensables para comenzar la investigación, no es relevante su presentación en el cuerpo de la tesis por lo que se presentan en el apéndice II.

En el capítulo 2 se exponen las ventajas del esquema de control no lineal propuesto; una de las ventajas que presenta el esquema de control es la característica de intensificar la respuesta del esquema de control cuando el sistema se aleja del punto de operación y que relaja esta respuesta cuando el sistema se dirige al punto de operación, causando con esto un tiempo de control menor que el de un esquema PI convencional, menos oscilaciones y desviaciones menores que las producidas por el PI convencional. En el capítulo 3 se realiza un análisis de la física de los casos de estudio, la deducción de las ecuaciones que describen la dinámica de los dos casos, la especificación de los parámetros de cada caso y el comportamiento a lazo abierto de cada caso de estudio aquí presentado. En el capítulo 4 se exponen los resultados de simular los esquemas de control PI y NPI acoplados a las ecuaciones de los reactores CSTR y FBR. En el capítulo 5 se presentan las conclusiones a las que se llegan después de aplicar el esquema de control NPI en comparación con un PI y se plantean los trabajos a futuro que se pueden desprender de esta investigación.

Índice

Capítulo 1. Introducción	1
1.1 Objetivos	2
1.2 Antecedentes históricos	2
Capítulo 2. Métodos teóricos	6
2.1 Idea general del control no lineal	6
2.2 Esquema de control PI lineal convencional	7
2.3 Esquema de control no lineal propuesto	8
2.4 Valores propios	9
Capítulo 3. Casos de estudio	11
3.1 Reactor de Lecho Fluidizado	11
3.1.1 El Reactor de Lecho Fluidizado	11
3.1.2 Planteamiento del modelo matemático	13
3.1.3 Parámetros e información del caso de estudio	17
3.1.4 Comportamiento a lazo abierto	18
3.2 Reactor Continuo de Tanque Agitado	24
3.2.1 El Reactor Continuo de Tanque Agitado	24
3.2.2 Planteamiento del modelo matemático	27
3.2.3 Parámetros e información del caso de estudio	30
3.2.4 Comportamiento a lazo abierto	31
Capítulo 4. Simulaciones numéricas	36
4.1 Reactor Lecho Fluidizado	36
4.1.1 Control de composición de anhídrido maleico	37
4.2 Reactor Continuo de Tanque Agitado	48
4.2.1 Control de la temperatura del reactor	48
Capítulo 5. Conclusiones	61

Apéndice 1	62
A.1.1 Nomenclatura	62
A.1.2 Definiciones	64
Apéndice 2	66
A.2.1 Método de sintonizado por respuesta al escalón	66
A.2.2 Método de sintonizado para el esquema NPI	68
A.2.3 <i>Internal Model Control</i> (IMC)	69
A.2.4 Cálculo de puntos de equilibrio	71
A.2.5 Análisis de estabilidad	76
A.2.6 Sintonizado por respuesta en escalón	80
Bibliografía	84

Índice de Figuras

2.2.1	Dinámica del error relativo, provocada por un control PI	17
3.1.1	Esquema de un reactor de lecho fluidizado no adiabático	21
3.1.2	Dinámica de las concentraciones del FBR (a lazo abierto) a las condiciones de alimentación de la sección 3.1.3 y un $F = 0.25$	29
3.1.3	Dinámica de las temperaturas del FBR (a lazo abierto) a las condiciones de alimentación de la sección 3.1.3 y un $F = 0.25$	30
3.1.4	Retrato de los estados estacionarios del FBR (a lazo abierto) a las condiciones de alimentación de la sección 3.1.3	31
3.1.5	Retrato fase del FBR (a lazo abierto) a las condiciones de alimentación de la sección 3.1.3 y un $F = 0.25$, cambiando las condiciones iniciales de operación	32
3.2.1	Esquema de un reactor continuo de tanque agitado no adiabático	34
3.2.2	Dinámica estable de la concentración y de la temperatura del CSTR (a lazo abierto) a las condiciones de alimentación de la sección 3.2.3 y una $T_c = 368.0 K$	41
3.2.3	Dinámica inestable de la concentración y de la temperatura del CSTR, a lazo abierto, a las condiciones de alimentación de la sección 3.2.3 y una $T_c = 368.4 K$	42
3.2.4	Retrato de los estados estacionarios del CSTR (a lazo abierto) a las condiciones de alimentación de la sección 3.2.3	43
3.2.5	Retrato fase del CSTR, a lazo abierto, a las condiciones de alimentación de la sección 3.2.3 y una $T_c = 368.0 K$, cambiando las condiciones iniciales de operación	44
4.1.1	Reactor de lecho fluidizado, control PI convencional, a diferentes valores de α	49
4.1.2	Reactor de lecho fluidizado, control PI convencional, efecto del cambio del punto de operación	50
4.1.3	Reactor de lecho fluidizado, control PI convencional, efecto de una perturbación de la concentración de alimentación al reactor	51
4.1.4	Reactor de lecho fluidizado, control PI convencional, efecto de una perturbación en la temperatura de la alimentación al reactor	52

4.1.5	Reactor de lecho fluidizado, control NPI, a diferentes valores de α	53
4.1.6	Reactor de lecho fluidizado, control NPI, efecto del cambio del punto de operación	54
4.1.7	Reactor de lecho fluidizado, control NPI, efecto de una perturbación de la concentración de alimentación al reactor	55
4.1.8	Reactor de lecho fluidizado, control NPI, efecto de una perturbación en la temperatura de la alimentación al reactor	56
4.2.1	Reactor continuo de tanque agitado, control PI convencional, a diferentes valores de α	61
4.2.2	Reactor continuo de tanque agitado, control PI convencional, efecto del cambio del punto de operación	62
4.2.3	Reactor continuo de tanque agitado, control PI convencional, efecto de una perturbación de la concentración de alimentación al reactor	63
4.2.4	Reactor continuo de tanque agitado, control PI convencional, efecto de una perturbación en la temperatura de la alimentación al reactor	64
4.2.5	Reactor continuo de tanque agitado, control NPI, a diferentes valores de α	65
4.2.6	Reactor continuo de tanque agitado, control NPI, efecto del cambio del punto de operación	66
4.2.7	Reactor continuo de tanque agitado, control NPI, efecto de una perturbación de la concentración de alimentación al reactor	67
4.2.8	Reactor continuo de tanque agitado, control NPI, efecto de una perturbación en la temperatura de la alimentación al reactor	68
A.2.1	Curva de reacción del proceso o respuesta al escalón	75
A.2.2	Diagrama de bloques para la prueba escalón a circuito cerrado	75
A.2.3	Punto de equilibrio único del FBR, Temperatura adimensional del reactor contra Temperatura adimensional de la chaqueta	82
A.2.4	Puntos de equilibrio del CSTR, Temperatura (K) contra Concentración (Fracción molar)	84
A.2.5	Tasa de reacción del anhídrido maleico contra el Flujo de la chaqueta de enfriamiento	85

A.2.6	Respuesta de la composición del anhídrido maleico a cambios en escalón del flujo de alimentación a la chaqueta	89
A.2.7	Respuesta de la temperatura del reactor a perturbaciones en escalón de la temperatura de la chaqueta	91

Lista de Acrónimos

NPI.....	<i>Nonlinear Proportional Integral</i>
SISO.....	<i>Single Input Single Out</i>
PI.....	Proporcional Integral
CSTR.....	<i>Continuous Stirred Tank Reactor</i>
FBR.....	<i>Fluidized Bed Reactor</i>
AM.....	Anhídrido maleico

Prefacio

El control por retroalimentación es un elemento muy importante en el control industrial, la referencia más antigua que se tiene de la aplicación de esta técnica, es la de James Watt, el cual hace 200 años la aplicó para controlar un proceso que consistía en mantener constante la velocidad de una máquina de vapor con carga variable.

El objetivo de la presente tesis es abordar el problema de regulación de reactores químicos continuos por medio del control proporcional integral no lineal (NPI) propuesto por *Shahruz y Schwartz* (1994). Este problema de control está motivado por los resultados obtenidos por *Armstrong, Neevel, y Kusik* (2001) en sistemas mecánicos, en los cuales se reduce el tiempo de control y los valores máximos y mínimos del error relativo en comparación con el control proporcional integral lineal.

El presente trabajo se realiza para sistemas de una entrada y una salida (SISO), y se busca la regulación del sistema, la minimización del tiempo de control y de las variaciones del error relativo; la regulación del sistema se lleva a cabo en un punto de equilibrio inestable (si es que lo hay); para hacer el análisis de estabilidad se recurre al cálculo de los valores propios de la matriz Jacobiana del sistema linealizado evaluada en los puntos de equilibrio del sistema.

En el segundo capítulo denominado “Métodos teóricos” se describe la idea general del control no lineal propuesto, el esquema de control proporcional integral (PI) lineal, el esquema de control NPI propuesto y la relación de los valores propios con la estabilidad del sistema; se continúa en el capítulo 3 con una descripción y análisis de los casos de estudio propuestos; en el capítulo 4 denominado “Simulaciones numéricas”, se aplica el esquema de control PI lineal y el esquema NPI propuesto a los casos de estudio, y se discuten los resultados arrojados por esas simulaciones; en el capítulo 5 se presentan las conclusiones y los trabajos futuros que se desprenden de esta tesis.

Posteriormente se presentan los apéndices y las referencias bibliográficas citadas en esta tesis de maestría.

En cuanto a la presentación del trabajo, el texto fue capturado con el procesador Word 2000, las ecuaciones en el editor MathType³ 4.0b, las Figuras fueron capturadas en Origin 6.0 y la programación para las simulaciones numéricas se realizaron en el lenguaje Visual Fortran 6.0a.

Capítulo 1

Introducción

Motivación

Los procesos químicos como los fenómenos de la naturaleza son invariablemente no lineales y aunque no en todos los procesos químicos es necesario aplicar un control no lineal, hay casos en que los controladores tradicionales no regulan de forma satisfactoria o simplemente no estabilizan al sistema en el punto de operación deseado. En esos casos resulta interesante utilizar esquemas de control no lineales. En los trabajos de *Armstrong, Neevel, y Kusik* (2001) y *Xu Yangming, Hollerbach y Donghai* (1995) las estructuras de control no lineales que fueron implementadas en sistemas mecánicos, suelen controlar el sistema en menos tiempo y con oscilaciones de menor magnitud, por esta razón resulta interesante implementar por medio de simulaciones un controlador no-lineal en reactores químicos continuos, especialmente en un reactor continuo de tanque agitado (CSTR) y en un reactor de lecho fluidizado (FBR), los cuales son ampliamente utilizado en la industria química.

Los reactores continuos de tanque agitado, no sólo son ampliamente utilizados en la industria química, sino que también son, en muchas ocasiones, la parte central de un proceso químico completo y es por ello que el control de la operación de los CSTR ha sido de gran importancia para la industria química.

Definición del Problema

En el control de reactores químicos, la acción integral de control ayuda a llevar a las variables de estado hasta el punto de operación deseado, pero también puede conducir a oscilaciones en las variables de estado, esto en algunos casos va en detrimento del proceso químico, pero en otros casos es importante que eso no suceda o que por lo menos que las oscilaciones de las variables de estado se mantengan en un intervalo de operación en el que no se tengan daños a los reactivos, los productos finales, o el equipo mismo. Para abordar el

problema de mantener las variables de estado en un intervalo de operación, se implementa una estructura de control que contiene una acción integral no lineal, y ganancias no lineales; con esto se espera lograr que las oscilaciones de las variables de estado se mantengan en un intervalo de operación o ancho de banda determinado.

1.1 Objetivos

Objetivo General. Aplicar un esquema de control proporcional integral no lineal en la regulación de reactores químicos.

Objetivos Particulares. Comparar el comportamiento del esquema de control proporcional integral no lineal propuesto, con el comportamiento de esquemas de control proporcional integral lineal en un Reactor de Lecho Fluidizado y un Reactor Continuo de Tanque Agitado.

1.2 Antecedentes históricos

¿Qué usar, un control lineal o uno no lineal? Esta pregunta es básica para el desarrollo de la tesis, si bien es cierto todos los procesos químicos son no lineales es cierto también que no todos requieren un esquema de control no lineal, ¿cuál sería la directriz a seguir entonces?, si sabemos que todos los procesos químicos son no lineales, debemos reconocer también que unos son evidentemente menos lineales que otros. Partiendo de ese punto los procesos químicos en los que se evidenciaría las ventajas de los esquemas de control no lineal serían aquellos que estuvieran más cargados de un comportamiento no lineal, en los cuales un esquema de control básico no estabilizaría de forma satisfactoria o simplemente no estabilizaría al sistema en el punto de operación deseado.

La revisión bibliográfica de los trabajos que se han hecho en control no lineal de procesos químicos, se dividirá en dos partes de 1967 a 1991 y de 1992 hasta 2002, esto por que de la década de 1990 a la fecha el número de trabajos hechos sobre control no lineal ha crecido de forma rápida; teniendo un número muy grande de artículos en la segunda

sección de la revisión, por lo tanto sólo se mencionaran los artículos más ligados a este trabajo de tesis.

En la primera parte de la revisión de artículos que abordan el problema del control de procesos químicos usando técnicas de control no lineal, tenemos a *Luyben W. L.* (1968) quien realizó un estudio del control retroalimentado no lineal en reactores químicos; y a *Marroquin y Luyben* (1972) que evaluaron experimentalmente un controlador cascada no lineal en un reactor por lotes. También *Bruns et al.* (1975 y 1977) realizó un estudio sobre el proceso de regulación retroalimentada no lineal de un CSTR no isotérmico, alrededor de un punto de equilibrio inestable. *Cebuhar y Costanza* (1984) aplicaron un control no lineal de un CSTR. *Castro et al.* (1987) estudio el control retroalimentado no lineal y la estimación del estado estable de una columna de destilación. *Rugh W. J.* (1987) estudió el diseño de controladores PID no lineales.

En lo que respecta al control de reactores biológicos usando técnicas de control no lineal, tenemos que *Kravaris* (1988) presentó un trabajo sobre la analogía no-lineal de la ubicación de polos en los ceros del proceso, por otro lado *Brengel y Seider* (1989) trabajaron en un controlador predictivo no-lineal de pasos múltiples, mientras que *Henson y Seborg* (1990) implementaron estrategias de control no lineal para un fermentador continuo.

Álvarez et al. (1989) presentó un trabajo llamado “control global no lineal de un reactor continuo de tanque agitado”. *Bartusiak et al.* (1989) realizaron un trabajo sobre diseño de estructuras de control retroalimentado sobre estructuras precalculadas no lineal en sistemas de síntesis. *Alsop y Edgar* (1990) trabajaron en el control no lineal de columnas de destilación de alta pureza. *Jayadeva et al.* (1990) propusieron un esquema de control no lineal para un proceso de regulación de pH. *Wright y Kravaris* (1991) propusieron un control no lineal de regulación de pH.

Para ilustrar más los antecedentes históricos sobre control de procesos químicos usando técnicas de control no-lineal desde el 1967 a 1991, se muestra la siguiente tabla, la cual es tomada de la referencia [2]:

Tabla 1. Procesos químicos controlados usando técnicas de control no lineal

	Reactores Bioquímicos
Bequette (1990)	
Brengel y Seider (1989)	
Henson y Seborg (1990)	
Kravaris (1988)	
	Reactores Químicos
Adebekun y Schork (1989)	
Aluko (1988)	
Álvarez et al. (1989)	
Bartusiak et al. (1989)	
Brown et al. (1990)	
Bruns y Bailey (1975, 1977)	
Cebuhar y Costanza (1984)	
Economou y Morari (1985)	
Kravaris (1988)	
Kravaris et al. (1989)	
Luyben (1968)	
Marroquin y Luyben (1972)	
Morningred et al. (1990)	
Parrish y Brosilow (1986)	
Patwardhan et al. (1990)	
Sistu y Bequette (1990)	
	Destilación
Alsop y Edgar (1990)	
Castro et al. (1987)	
Lu y Holt (1990)	
	Nivel
Cheung y Luyben (1980)	
Rugh (1987)	
Shunta y Fehervari (1976)	
	pH
Jayadeva et al. (1990)	
Parrish y Brosilow (1988)	
Wright y Kravaris (1991)	
	Sistemas con Tiempo Muerto
Bequette (1990)	
	Contracción de la Variable Manipulada
Bequette (1990)	
Patwardhan et al. (1990)	
Sistu y Bequette (1990)	

Aunque es cierto que los trabajos anteriormente mencionados son sobre control no lineal, también es cierto que no están relacionados con la estrategia utilizada en este trabajo y sólo se les menciona por ser avances en el control con estrategias no lineales.

Los trabajos que se han desarrollado en lo que respecta a estrategias de control no lineal hasta 1991 son muchos y variados, pero de 1991 a la fecha la cantidad de trabajos sobre control de procesos que utilizan técnicas de control no lineal ha crecido de forma descomunal; uno de los trabajos que sirvió de pilar importante para el desarrollo de esta tesis fue publicado por *Shahruz y Schwartz* (1994). En este artículo se plantea el esquema de control que se aplica en esta tesis y se propone una forma de optimizar los parámetros del esquema de control; del trabajo desarrollado por *Armstrong, Neevel, y Kusik* (2001) se toma la idea de proponer ganancias no constantes, las cuales pueden tomar un valor máximo o un valor mínimo dependiendo de la dirección que tome el sistema: si el sistema se aleja del punto de operación deseado las ganancias toman un valor máximo y si el sistema se acerca al punto de operación deseado las ganancias toman un valor mínimo. En otra publicación realizada por *Xu Yangming, Hollerbach y Donghai* (1995) se presentan ganancias que varían con la misma idea que proponen *Armstrong, Neevel, y Kusik* pero en lugar de tomar sólo un valor mínimo o un valor máximo, las ganancias pueden tomar cualquier valor entre el valor mínimo y el valor máximo. En este trabajo la idea es que cuando el sistema se aleja del punto de operación deseado las ganancias vayan creciendo hasta un valor máximo y cuando el sistema se acerque al punto de operación deseado las ganancias vayan decreciendo hasta un valor mínimo. En suma, en el trabajo de *Armstrong, Neevel, y Kusik* las ganancias sólo toman dos valores, uno alto y otro bajo y en el trabajo de *Xu Yangming, Hollerbach y Donghai* las ganancias pueden tomar todos los valores entre el valor alto y el bajo propuesto por *Armstrong, Neevel, y Kusik*.

Para los casos de estudio se tienen dos reactores, un reactor continuo de tanque agitado publicado por *Aris* (1956) y un reactor de lecho fluidizado publicado por *Aoufoussi et al.* (1992), a estos dos casos de estudio se les controla la composición del producto deseado. *Bequette Wayne* (1991) realizó una revisión teórica e histórica sobre estrategias de control no lineal, haciendo lo propio *Nikolaou y Misra* (2001) abordaron el tema del control lineal y no lineal, exponiendo las razones por las cuales usar un esquema de control lineal o no lineal.

Capítulo 2

Métodos Teóricos

En este capítulo se ve la teoría relacionada con los puntos importantes de este trabajo de tesis.

2.1 Idea general del control no lineal

La idea fundamental del esquema de control no lineal, como el que se maneja en este trabajo de tesis, es no mantener una capacidad de respuesta constante en los diferentes estados del sistema como se hace en las estructuras tradicionales de control, sino que la capacidad de respuesta dependa de la dirección en la que cambie la variable de estado a controlar respecto del punto de operación deseado.

Lo anterior se logra variando la ganancia proporcional con respecto a la dirección en la que cambie la variable a controlar, esto es que cuando la variable a controlar se mueva en dirección del punto de operación, se aplica una ganancia proporcional pequeña y cuando la variable a controlar se aleja del punto de operación, se aplica una ganancia proporcional grande; para ilustrar por qué se eligen ganancias pequeñas y ganancias grandes en cada caso y qué magnitud se adjudica a “pequeña” y a “grande” recordaremos que cuando crece la ganancia proporcional el esquema de control regula más rápido al sistema, pero se llega a un valor que inestabiliza al sistema y que conforme la ganancia proporcional decrece la estructura de control regula más lentamente al sistema sin desestabilizarlo, hasta llegar a un punto en el que el sistema prácticamente presenta una dinámica a lazo abierto; el dilema será qué tan rápido se quiere regular al sistema, sin pagar el precio de esa regulación rápida. Si optamos por ganancias muy pequeñas para evitar inestabilidades en nuestro sistema, entonces el control se vuelve lento y tal vez ineficiente y por lo mismo se opta por alternar ganancias grandes y pequeñas en el tiempo que se aplica el control; de esa forma intensificamos la respuesta del esquema de control cuando nos alejamos del punto de operación o relajamos la respuesta cuando nos acercamos al punto de operación deseado; esa es la idea fundamental de la estrategia de control no lineal utilizada en este trabajo de tesis.

2.2 Esquema de control PI lineal convencional

El control PI es un método de control muy popular utilizado en la industria, por su sencillez y por su fácil aplicación sin necesidad de grandes computadores y por ende sin implicaciones económicas.

En este esquema de control la acción proporcional ayuda a estabilizar el sistema, la ganancia proporcional nos permite intensificar o relajar la respuesta del esquema de control cuando la ganancia es grande o pequeña respectivamente. La acción integral nos permite también (como la ganancia proporcional) intensificar o relajar la respuesta del esquema de control, pero en este caso a diferencia de la ganancia proporcional que es constante, la acción integral es variante en el tiempo.

El esquema de control proporcional integral convencional, que se puede encontrar en cualquier literatura, es el siguiente:

$$u(t) = k_p e(t) + k_i \int_{t_0}^{t_1} e(t) dt \quad (2.1)$$

La forma en que gráficamente se puede observar el efecto de la acción integral sobre el esquema de control, es considerando la integral $\int_{t_0}^t e(t) dt$ como el área bajo la curva en la Figura 2.2.1, por lo tanto cuando el área bajo la curva entre t_0 y t_1 crece, la respuesta del esquema de control se intensifica y de forma contraria si el área bajo la curva entre t_0 y t_1 disminuye, la respuesta del esquema de control es relajada.

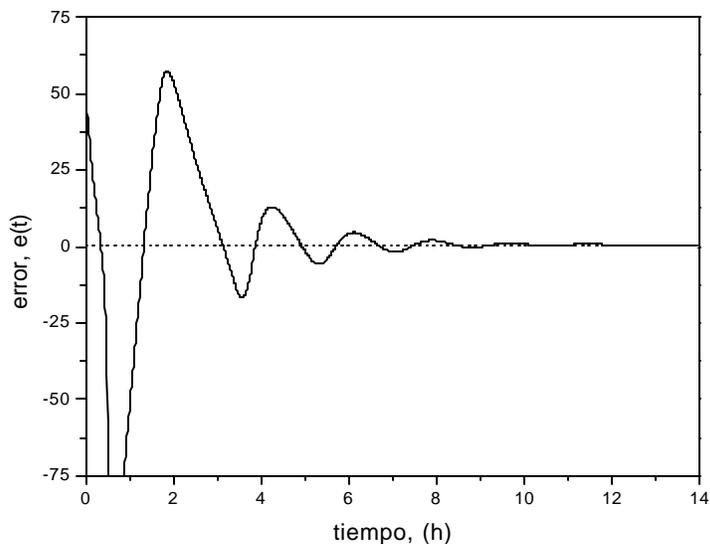


Figura 2.2.1 Dinámica del error relativo, provocada por un control PI.

Entre más nos alejamos del punto de operación deseado, en donde el error es igual a cero, el área bajo la curva crece, y por lo mismo, el valor de la salida del controlador $u(t)$ se incrementa también, es por ello que se dice que la acción integral intensifica o relaja la respuesta del esquema de control.

2.3 Esquema de control no lineal propuesto

El esquema de control propuesto para la regulación de los reactores químicos que se presentan como casos de estudio, se basa como ya se explicó en la sección 2.1 en intensificar la respuesta del esquema de control cuando el valor de la variable a controlar se aleje del punto de operación y relajar la respuesta del esquema de control cuando el valor de la variable a controlar se mueva hacia el punto de operación. Esto se logra implementando una ganancia proporcional que cambia de una ganancia grande a una

pequeña, dependiendo de la dirección del valor de la variable a controlar con respecto al punto de operación.

Una de las características de este esquema de control es que reduce la magnitud de las oscilaciones que se tendrían si se usara un controlador PI, así como el tiempo de control que presentaría un esquema PI; y por ello esta estrategia es recomendada para esquemas de control PI o PID, los cuales se aplican a sistemas o regiones de operación inestables.

Para aplicar esta lógica de control, se propone un esquema de control que no es linealmente dependiente del error relativo y que fue propuesto por Shahruz S. M. y Schwartz A. L. (1900). Este esquema de control está dado por:

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = \frac{e(t)}{1 + m^2 e^2(t)}, \quad \mathbf{x}(0) = 0 \quad (2.2)$$

$$u(t) = k_r \mathbf{x}(t) + [k_p + g_p e^{I|e(t)|}] e(t) \quad (2.3)$$

Y las ganancias del proceso que se apegan a la lógica de control propuesta y las cuales fueron expuestas por Armstrong, Neevel, y Kusik (1900) son las siguientes:

$$k_p = \begin{cases} k_0, & \text{si } \text{sgn}(e) \neq \text{sgn}(\dot{e}) \\ k_0 + k_1, & \text{si } \text{sgn}(e) = \text{sgn}(\dot{e}) \end{cases} \quad (2.4)$$

2.4 Valores Propios

Los valores propios según la teoría de estabilidad de Lyapunov para sistemas lineales determinan si el sistema lineal o linealizado es estable o no. Por esta razón los valores propios son especialmente importantes para el desarrollo de este trabajo de tesis, ya que son una herramienta importante y practica para análisis de estabilidad del sistema linealizado alrededor de un punto de equilibrio a lazo abierto o cerrado. Los valores propios son las raíces de la ecuación característica de la matriz asociada al sistema.

El criterio de estabilidad para sistemas lineales de Lyapunov dice que si las raíces de la ecuación característica son: $\text{Re}(\mathbf{I}_i) \leq 0$ entonces el sistema es estable y si $\text{Re}(\mathbf{I}_i) < 0$, entonces el sistema es asintóticamente estable.

Se puede ver que un sistema es estable en un punto dado ya que en la solución del sistema lineal aparece el término $e^{\text{Re}(\mathbf{I}_i)t}$ y para que el término exponencial de la solución permanezca finito conforme se incrementa el tiempo ($t \rightarrow \infty$) la parte real de los valores propios debe ser negativa ($\text{Re}(\mathbf{I}_i) \leq 0$).

Capítulo 3

Casos de Estudio

En este capítulo se tratan el reactor de lecho fluidizado y el reactor continuo de tanque agitado, ya que estos son los casos de estudio.

3.1 Reactor de Lecho Fluidizado

En esta sección se abordan el esquema y una breve descripción del reactor de lecho fluidizado, las consideraciones que se hicieron para deducir su modelo matemático, los parámetros del caso que se utiliza, así como su comportamiento a lazo abierto.

3.1.1 El Reactor de Lecho Fluidizado

Un reactor de lecho fluidizado consiste en un recipiente cilíndrico de volumen V con tuberías para alimentar y desalojar. Por las tuberías de alimentación entran los reactivos A_1, A_2, \dots, A_n , a una velocidad de flujo volumétrico u_b y por la tubería para desalojar salen los productos A_{n+1}, \dots, A_m y los reactivos remanentes a una velocidad de flujo de u_b . La

reacción puede ser escrita de la siguiente manera, $\sum_1^m \mathbf{a}_j A_j = 0$, en donde $\mathbf{a}_{n+1}, \mathbf{a}_{n+2}, \dots, \mathbf{a}_m$

son positivos y el resto de las \mathbf{a} negativas. Este cilindro es inmerso dentro de otro cilindro de volumen anular V_c , perfectamente mezclado, con alimentación de aire de enfriamiento a temperatura T_{cf} a una velocidad de flujo de F_c .

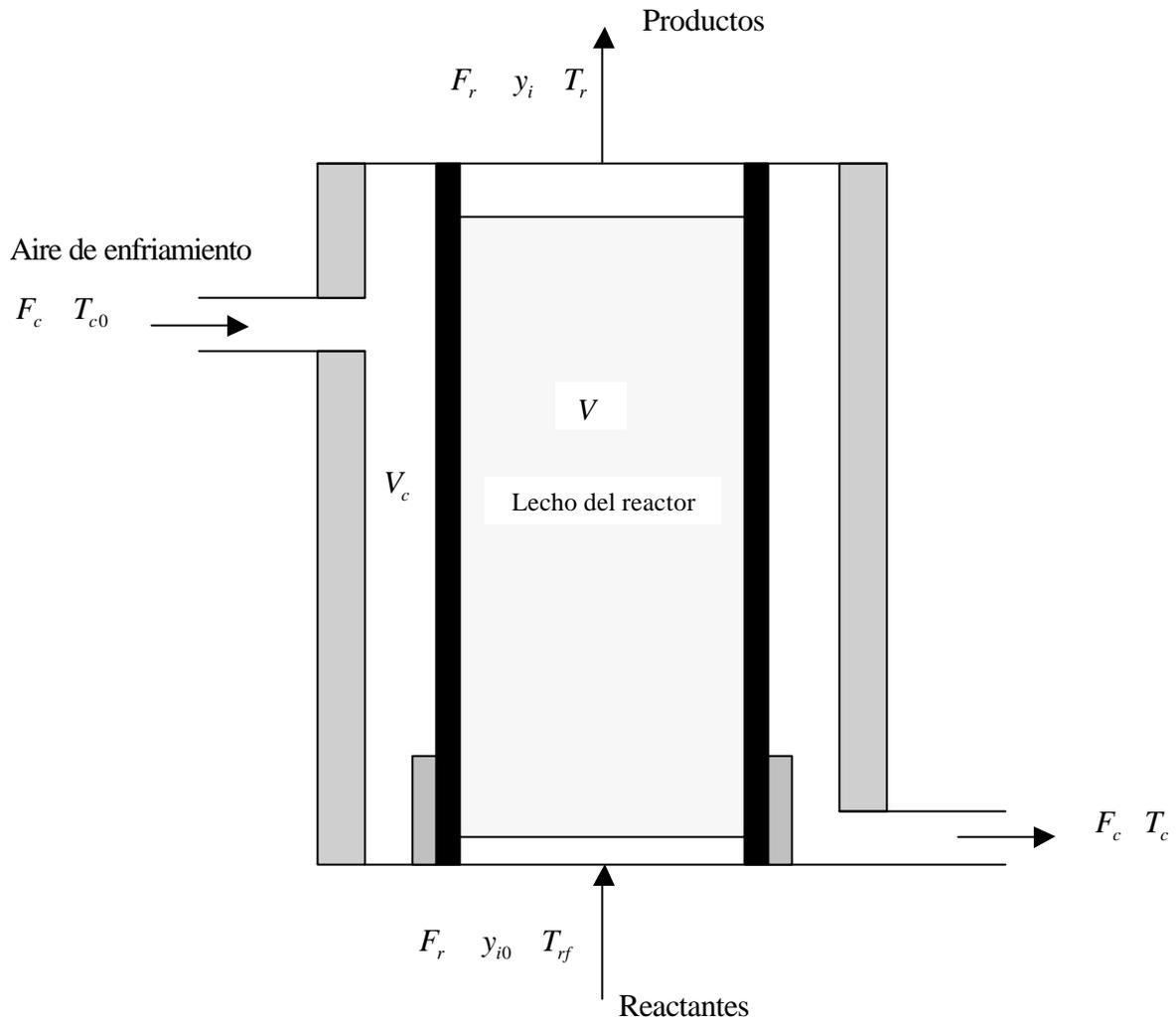


Figura 3.1.1 Esquema de un reactor de lecho fluidizado no adiabático.

Para complementar la descripción del reactor de lecho fluidizado, se establecen las siguientes hipótesis:

Hipótesis 1. El volumen del reactor V y el volumen de la chaqueta de enfriamiento V_c son constantes, como también lo son el flujo de alimentación al reactor q_f y la temperatura de alimentación a la chaqueta T_{cf} .

Hipótesis 2. Se asume pseudo estado estacionario en la fase continua en relación con la dinámica de la fase emulsión.

Hipótesis 3. Se considera que el lecho completo se encuentra uniformemente distribuido.

Hipótesis 4 La pared del reactor y la estructura que lo soporta se encuentran a la misma temperatura uniforme.

Hipótesis 5. La conductividad de la pared del reactor es extremadamente alta.

Hipótesis 6 El calor transferido al interior y al exterior de la pared del reactor, en donde la temperatura de la superficie de la pared del reactor va a ser denotada por T_w , puede ser descrito por el coeficiente de transferencia de calor h_i y h_o tal que la transferencia de calor por unidad de área es $h_i(T_r - T_w)$ y $h_o(T_w - T_c)$ respectivamente.

Hipótesis 7. El transporte de cantidad de movimiento se lleva a cabo en régimen turbulento.

3.1.2 Planteamiento del modelo matemático

Balance de materia en la fase continua:

La fase continua puede suponerse en estado pseudo estacionario con relación a la dinámica de la fase emulsión, Hipótesis 2. Esta suposición permite escribir un balance en estado pseudo estacionario para la fase continua, de la siguiente manera:

$$u_b \frac{dC_{b,i}}{dz} = F_{be} (C_{b,i} - C_{e,i}) \quad (3.1.1)$$

Desde este momento en lo adelante i será igual a: $i = BZ, AM$, las condiciones en la frontera son $C_{b,i} = C_{o,i}$ en $z = 0$, F_{be} es el coeficiente de transferencia de masa para cada componente entre la fase continua y la fase emulsión.

Balance de materia en la fase emulsión:

El balance de materia en estado no estacionario en cada componente, sobre la fase emulsión completa uniformemente distribuida (Hipótesis 3) da como resultado la siguiente ecuación:

$$V \frac{dC_{e,i}}{dt} = u_{mf} A_r (C_{0,i} - C_{e,i}) + u_b \mathbf{e}_b A_r (C_{b,i} - C_{e,i}) + M_{cat} \sum_{j=1}^3 v_{ij} r_j \quad (3.1.2)$$

Si integramos el balance de materia de la fase continua (3.1.1), obtenemos:

$$(C_{b,i} - C_{e,i}) = (C_{0,i} - C_{e,i}) e^{\frac{F_{bc} z}{u_b}} \quad (3.1.3)$$

Incluyendo la ecuación (3.1.3) en la ecuación (3.1.2), obtenemos la siguiente ecuación para la concentración en la fase emulsión:

$$V \frac{dC_{e,i}}{dt} = A_r (C_{0,i} - C_{e,i}) \left\{ u_{mf} + u_b \mathbf{e}_b \left(e^{\frac{F_{bc} H}{u_b}} \right) \right\} + M_{cat} \sum_{j=1}^3 v_{ij} r_j \quad (3.1.4)$$

Balance de energía en el reactor:

Un balance de energía combinado gas/sólido sobre el lecho uniforme distribuido (Hipótesis 3) puede ser escrito de la siguiente forma:

$$(M_c C_{p,cat} + \mathbf{e}_b V \mathbf{r}_g C_{p,g}) \frac{dT}{dt} = C_{p,g} (T_0 - T) + h_i a_i (T_w - T) + M_{cat} \sum_{j=1}^3 r_j \Delta H_{ij} \quad (3.1.5)$$

Balance de energía en las paredes del reactor:

Con la aseveración de que la pared del reactor y la estructura que la soporta están a una misma temperatura uniforme (Hipótesis 4) podemos escribir:

$$M_w C_{p,w} \frac{dT_w}{dt} = h_i a_i (T_r - T_w) - h_o a_o (T_w - T_c) + I Q \quad (3.1.6)$$

En la chaqueta de enfriamiento:

La respuesta de la temperatura de la chaqueta de enfriamiento es mucho más rápida que la respuesta del resto de las variables del proceso y eso nos permite asumir que se encuentra en pseudo estado estacionario con respecto de las demás variables; por lo tanto, el balance de energía se puede escribir de la siguiente forma:

$$0 = F_{cm} C_{p_c} (T_{c0} - T_c) + h_o a_o (T_w - T_c) + (1 - I) Q \quad (3.1.7)$$

Despejando la ecuación anterior (3.1.7), obtenemos que:

$$-h_o a_o (T_w - T_c) = F_{cm} C_{p_c} (T_{c0} - T_c) + (1 - I) Q \quad (3.1.8)$$

sustituyendo la relación (3.1.8) en la ecuación (3.1.6), obtenemos:

$$M_w C_{p_w} \frac{dT_w}{dt} = h_i a_i (T_r - T_w) + F_{cm} C_{p_c} (T_{c0} - T_c) + Q \quad (3.1.9)$$

Se supone que la temperatura de la pared del reactor es aproximadamente igual a la temperatura de la chaqueta (Hipótesis 5) y por lo tanto la ecuación (3.1.9) se re-escibe de la siguiente manera:

$$M_w C_{p_w} \frac{dT_w}{dt} = h_i a_i (T_r - T_w) + F_{cm} C_{p_c} (T_{c0} - T_w) + Q \quad (3.1.10)$$

Se proponen los siguientes cambios de variable con el fin de adimensionalizar el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden que aproxima la dinámica del transporte de materia y energía en el sistema:

$$C_i = \frac{y_i}{y^*} \quad T_i = \frac{(T_i - T_f)}{T^*} \quad F = \frac{F_c}{F^*}$$

En donde: $y_i = \frac{VC_i}{N_t}$, $T^* = \frac{RT_f^2}{E_m}$

- $y_i \in \mathfrak{R}^n$ es la fracción molar de la especie i
 N_t es el número total de moles en la fase gas
 y^* es la fracción molar característica de la alimentación del reactor
 T^* es la temperatura característica, K
 T_f es la temperatura de alimentación al reactor, K
 T_i es la temperatura i , K
 T_I es la temperatura adimensional i
 F^* es el flujo volumétrico máximo, $\frac{m^3}{s}$

Aplicando los cambios propuestos el sistema se reduce de la siguiente manera:

$$\frac{dC_{Bz}}{dt} = \mathbf{q}_C (C_{Bzf} - C_{Bz}) - \mathbf{a}_C (-r_{Bz}) \quad (3.1.11)$$

$$\frac{dC_{Am}}{dt} = \mathbf{q}_C (C_{Amf} - C_{Am}) - \mathbf{a}_C (-r_{Am}) \quad (3.1.12)$$

$$\frac{dT_r}{dt} = \mathbf{q}_T (T_{rf} - T_r) + \mathbf{g} (T_w - T_r) + \mathbf{a}_T \sum_{j=1}^3 \Delta H_j (r_j) \quad (3.1.13)$$

$$\frac{dT_w}{dt} = F \mathbf{q}_F (T_{jf} - T_w) + \mathbf{d} (T_r - T_w) + \mathbf{f} \quad (3.1.14)$$

En donde:

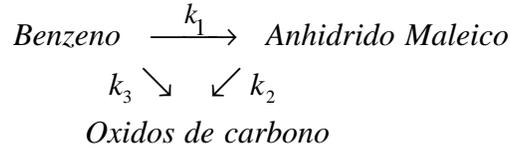
$$\mathbf{q}_C = \frac{A_r}{V} \left\{ u_{mf} + u_b \mathbf{e}_b \left(e^{\frac{F_{be}H}{u_b}} \right) \right\} \quad \mathbf{a}_C = \frac{M_{cat}}{y^* N_t} \quad \mathbf{q}_T = \frac{Cp_g}{(M_{cat} Cp_{cat} + \mathbf{e}_b V \mathbf{r}_g Cp_g)}$$

$$\mathbf{g} = \frac{h_i a_i}{(M_{cat} Cp_{cat} + \mathbf{e}_b V \mathbf{r}_g Cp_g)} \quad \mathbf{a}_T = \frac{M_{cat}}{T^* (M_{cat} Cp_{cat} + \mathbf{e}_b V \mathbf{r}_g Cp_g)}$$

$$\mathbf{q}_F = \frac{F^* Cp_c}{M_w Cp_w} \quad \mathbf{d} = \frac{h_i a_i}{M_w Cp_w} \quad \mathbf{f} = \frac{Q}{M_w Cp_w T^*}$$

3.1.3 Parámetros e información del caso específico

La reacción que se considera es la oxidación del benceno para producir anhídrido maleico y óxidos de carbono, como se muestra en el siguiente esquema triangular:



La cinética adimensional de esta reacción es:

$$(r_1) = k_1 \mathbf{x}_1(T_r) C_{Bz} \quad (r_2) = k_2 \mathbf{x}_2(T_r) C_{Am} \quad (r_3) = k_3 \mathbf{x}_3(T_r) C_{Bz} \quad (3.1.15, 16 \text{ y } 17)$$

En donde:

$$\mathbf{x}_i(T_r) = e^{\left(\frac{T_r b_i}{(1+T_r/b_m)}\right)} \quad (3.1.18)$$

Las velocidades de descomposición del benceno y del anhídrido maleico, son:

$$(-r_{Bz}) = [k_1 \mathbf{x}_1(T_r) + k_3 \mathbf{x}_3(T_r)] C_{Bz} \quad (3.1.19)$$

$$(-r_{Am}) = -k_1 \mathbf{x}_1(T_r) C_{Bz} + k_2 \mathbf{x}_2(T_r) C_{Am} \quad (3.1.20)$$

Los valores numéricos de los parámetros térmicos, cinéticos, de alimentación y de la ecuación de diseño son los siguientes:

$$T_f = 633.11 \text{ K} \quad T^* = 33.11 \text{ K} \quad y^* = 0.02 \quad 0.1 \leq F \leq 1.0$$

Parámetros térmicos, cinéticos y de la ecuación de diseño del reactor:

$$k_i = [0.1186 \ 0.0525 \ 0.0509]^T 10^{-4}$$

$$\Delta H_i = [1.5165 \ 1.1521 \ 2.6885]^T 10^6$$

$$\mathbf{b}_i = [1.1626 \ 0.6747 \ 1.1626]^T$$

$$\begin{array}{lll}
 \mathbf{b}_m = 19.1172 & \mathbf{d} = 12.0169 & \mathbf{f} = 0.2646 \\
 \mathbf{q}_c = 0.6265 & \mathbf{q}_T = 0.014 & \mathbf{q}_F = 0.1388 \\
 \mathbf{g} = 0.01 & \mathbf{a}_T = 5.457 \cdot 10^{-4} & \mathbf{a}_c = 1.2847 \cdot 10^{-4}
 \end{array}$$

Alimentación:

$$\begin{array}{ll}
 T_f = 633.1 \text{ K} & T_{rf} = 0.0 \\
 T_{cf} = 303.1 \text{ K} & T_{Jf} = -9.97 \\
 y_{Bzf} = 0.02 & C_{Bzf} = 1.0 \\
 y_{AMf} = 0.0 & C_{AMf} = 0.0
 \end{array}$$

3.1.4 Comportamiento a lazo abierto

En esta sección se aborda la dinámica a lazo abierto del FBR, de acuerdo con las condiciones de la sección 3.1.3 y una alimentación adimensional a la chaqueta de enfriamiento de $F = 0.25$; se presenta también el retrato de los estados estacionarios y el retrato fase.

La cinética que se presenta en este caso de estudio es altamente exotérmica, esto se puede apreciar en su vector de entalpías de reacción a condiciones estándar, el cual es:

$$\Delta H_i = [-1.5165 \quad -1.1521 \quad -2.6885]^T \times 10^6 \frac{\text{J}}{\text{mol}}$$

El transporte de cantidad de movimiento en este reactor se lleva a cabo en régimen turbulento, como ya se dijo en la hipótesis 7 de la sección 3.1.2

En las Figuras 3.1.1 y 3.1.2 se muestran las dinámicas de las concentraciones y las temperaturas del FBR a lazo abierto y a las condiciones que se establecen en la sección 3.1.3 y un $F = 0.25$, hasta abandonar el transitorio. En la Figura 3.1.3 se aprecia que la temperatura de la pared del reactor sube rápidamente, de acuerdo con la hipótesis 5, mas esto no debiera de sorprendernos ya que los balances de energía fueron hechos bajo esa suposición y por lo tanto concuerda con los resultados esperados.

El retrato de los estados estacionarios (Figura 3.1.3) a las condiciones que se establecen en la sección 3.1.3 y un $F = 0.25$, nos muestra el punto de conversión máxima y el dominio de la concentración y de las temperaturas, como este reactor no posee puntos de equilibrio inestables, el retrato de los estados estacionarios tampoco posee discontinuidades.

El retrato fase, Figura 3.1.4, nos muestra el camino que siguen las variables para llegar al estado estacionario bajo las condiciones de la sección 3.1.3 y un $F = 0.25$; esto a pesar de que las condiciones iniciales cambien. La ruta que seguirán las variables hasta llegar al estado estacionario será la misma y las variables se incorporaran inmediatamente a este camino a pesar de las condiciones iniciales de arranque del sistema, porque independientemente de dónde se inicie el sistema el estado estacionario será el mismo.

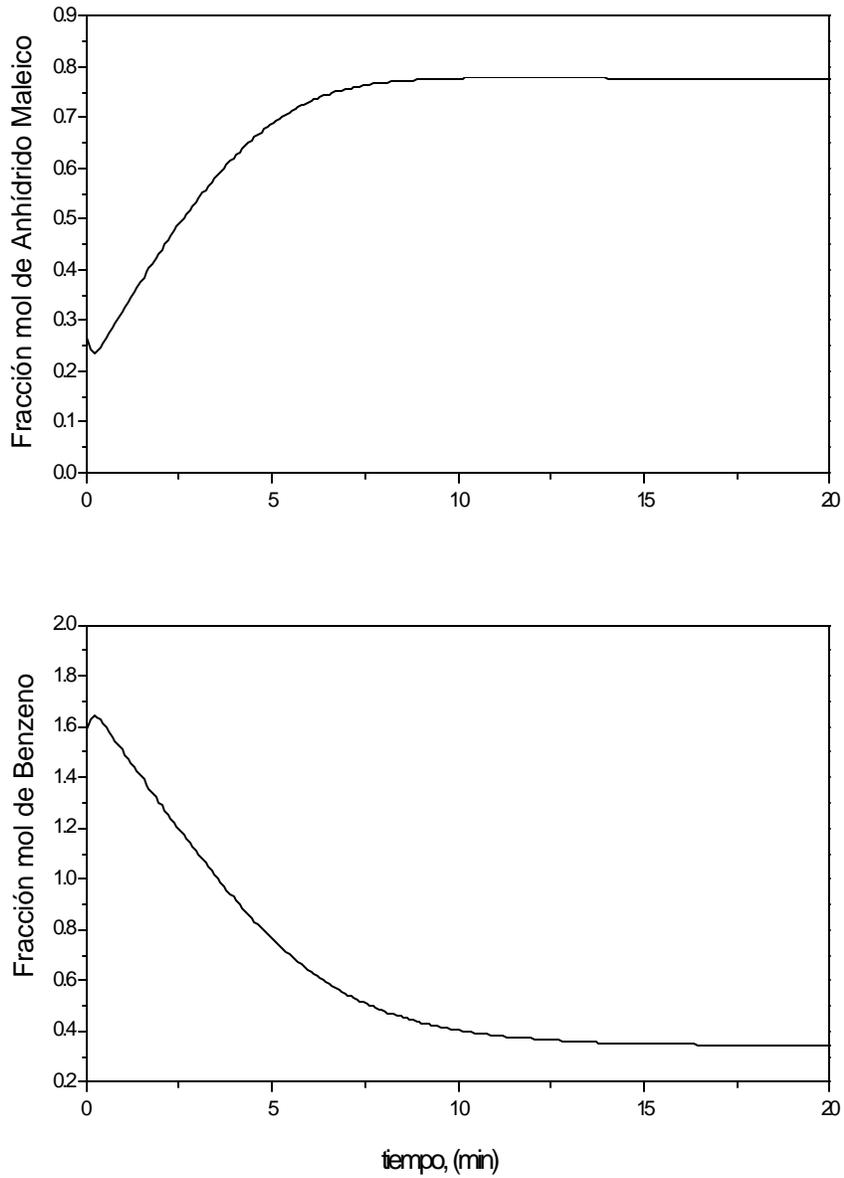


Figura 3.1.2 Dinámica de las concentraciones del FBR (a lazo abierto) a las condiciones de alimentación de la sección 3.1.3 y un $F = 0.25$

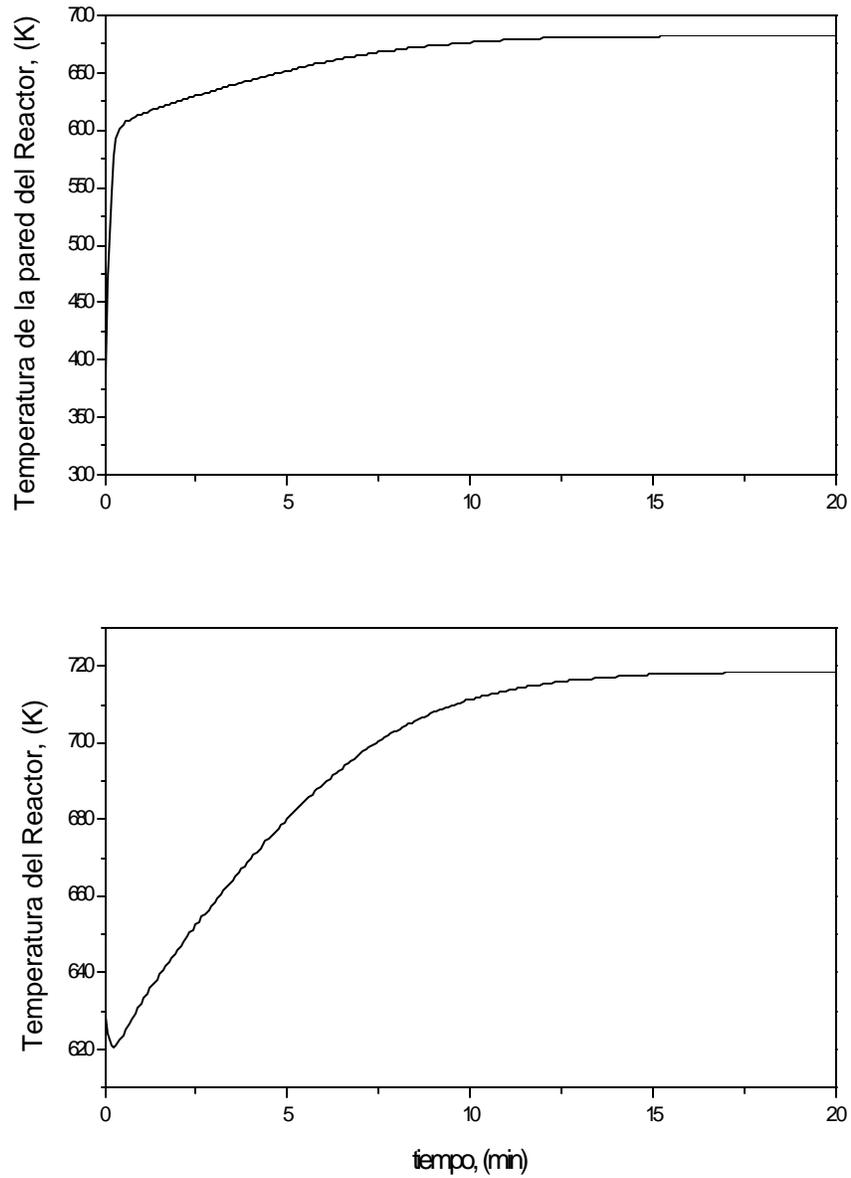


Figura 3.1.3 Dinámica de las temperaturas del FBR (a lazo abierto) a las condiciones de alimentación de la sección 3.1.3 y un $F = 0.25$

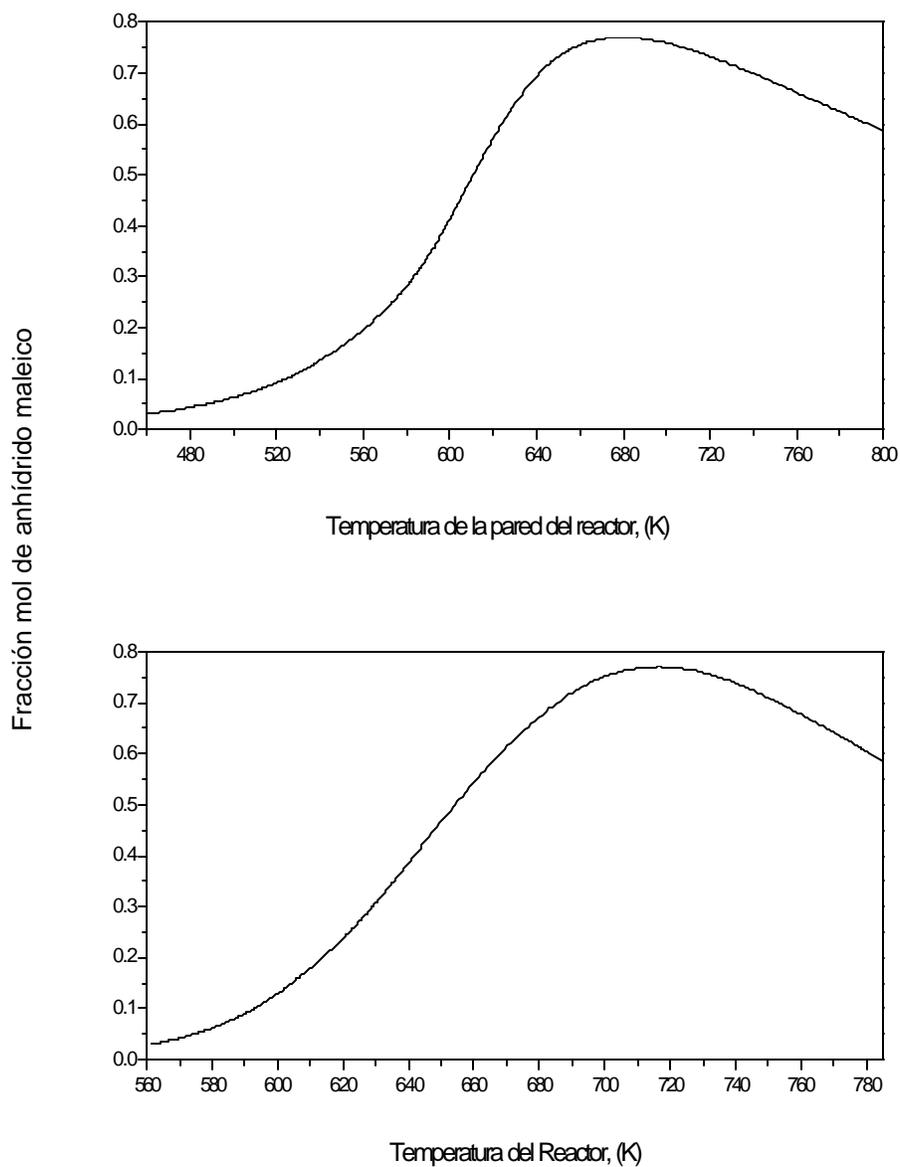


Figura 3.1.4 Retrato de los puntos de equilibrio del FBR (a lazo abierto) a las condiciones de alimentación de la sección 3.1.3

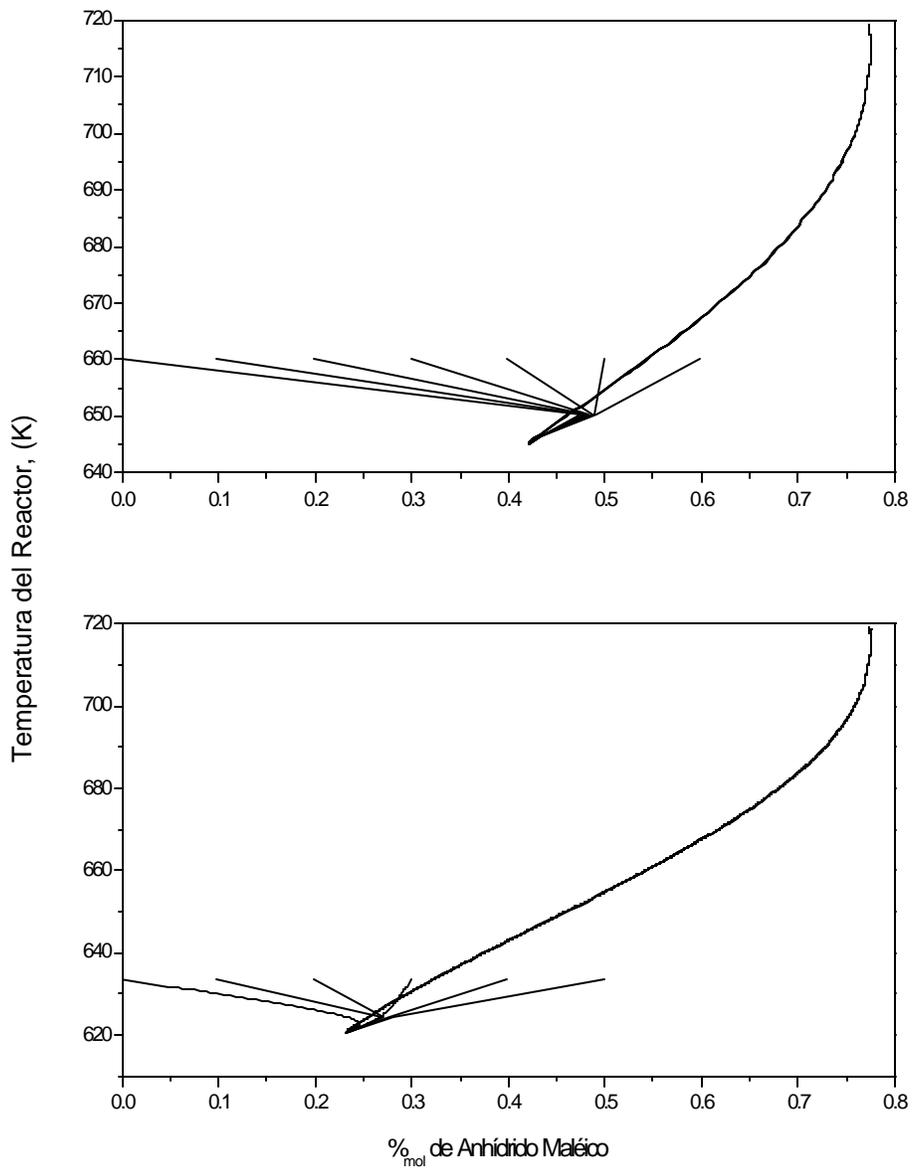


Figura 3.1.5 Retrato fase del FBR (a lazo abierto) a las condiciones de alimentación de la sección 3.1.3 y un $F = 0.25$, cambiando las condiciones iniciales de operación

3.2 Reactor Continuo de Tanque Agitado

En esta sección se abordan el esquema y una breve descripción del reactor continuo de tanque agitado, las consideraciones que se hicieron para deducir su modelo matemático, los parámetros del caso que se utiliza, así como su comportamiento a lazo abierto.

3.2.1 El Reactor Continuo de Tanque Agitado

Un reactor continuo de tanque agitado consiste en un recipiente cilíndrico de volumen V perfectamente agitado, con tuberías para alimentar y desalojar, por las tuberías de alimentación entran los reactivos A_1, A_2, \dots, A_n , a una velocidad de flujo volumétrico q_1, q_2, \dots, q_n y por la tubería para desalojar salen los productos A_{n+1}, \dots, A_m y los reactivos remanentes, a una velocidad de flujo de $q = q_1 + q_2 + \dots + q_n$. La reacción puede ser escrita

de la siguiente manera $\sum_1^m \mathbf{a}_j A_j = 0$, en donde $\mathbf{a}_{n+1}, \mathbf{a}_{n+2}, \dots, \mathbf{a}_m$ son positivos. Este

cilindro es inmerso dentro de otro cilindro de volumen anular V_c , también perfectamente mezclado, con alimentación de agua de enfriamiento a temperatura T_c a una velocidad de flujo de q_c .

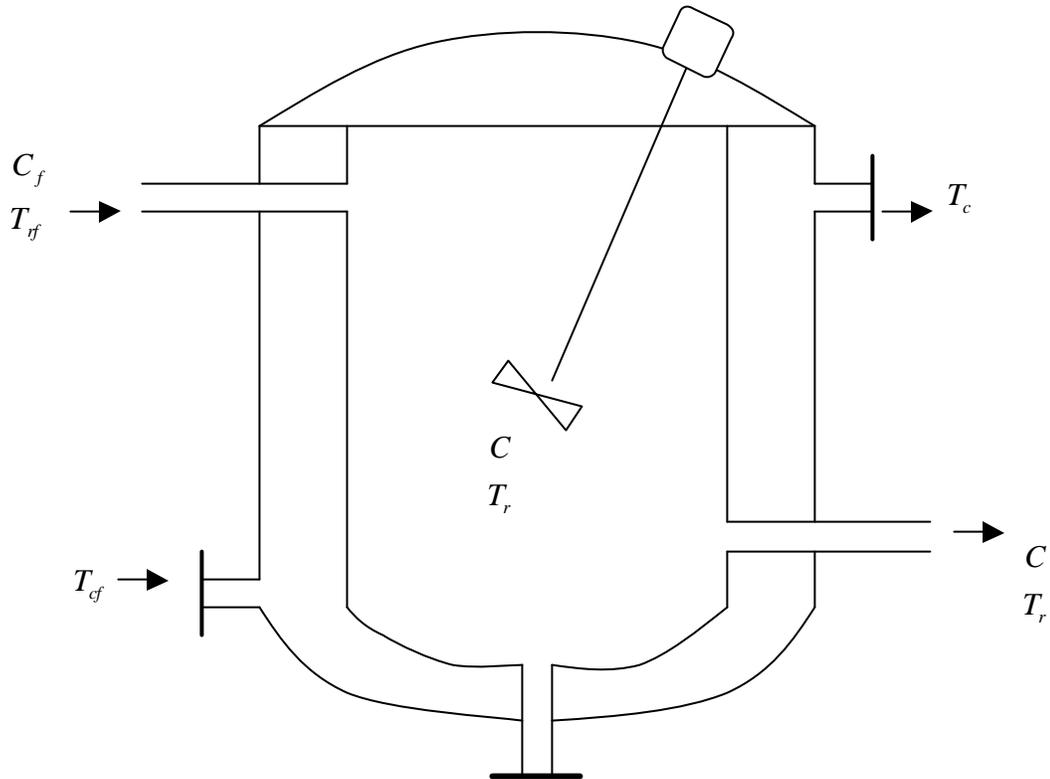


Figura 3.2.1 Esquema de un reactor continuo de tanque agitado no adiabático.

En donde:

$C \in \mathfrak{R}^n$ es el vector de concentración de las especies químicas involucradas, $\frac{mol}{m^3}$

$C_f \in \mathfrak{R}^n$ es el vector de la concentración de alimentación, $\frac{mol}{m^3}$

$T_r \in \mathfrak{R}$ es la temperatura del reactor, K

$T_{rf} \in \mathfrak{R}$ es la temperatura de alimentación al reactor, K

$T_c \in \mathfrak{R}$ es la temperatura de la chaqueta de enfriamiento, K

$T_{cf} \in \mathfrak{R}$ es la temperatura de alimentación a la chaqueta de enfriamiento, K

Nos permitimos dar por obvia la aplicabilidad de las leyes físicas, tales como la conservación de la materia y la energía o la ley de conducción de calor de Fourier y llamar a esto, la razón fundamental, la Hipótesis 0.

De la descripción anterior del reactor continuo de tanque agitado, se pueden desprender las siguientes hipótesis:

Hipótesis 1. El mezclado en el reactor y en la chaqueta de enfriamiento es perfecto, tal que la concentración C , la temperatura del reactor T_r y la temperatura de la chaqueta de enfriamiento T_c , son todos independientes de la posición, sin embargo ellos pueden ser funciones del tiempo. El volumen del reactor V y el volumen de la chaqueta de enfriamiento V_c son constantes, como también lo son el flujo de alimentación al reactor q_f y la temperatura de alimentación a la chaqueta T_{cf} .

Hipótesis 2. La velocidad de reacción es una función del tipo $r(C_1, \dots, C_m, T_r)$, de tal forma que la velocidad de cambio en el número de moles de A_j por la reacción solamente es $\mathbf{a}_j r$ por unidad de volumen.

Hipótesis 3. El calor transferido al interior y al exterior de la pared del reactor, en donde las temperaturas de la superficie van a ser denotadas por T_i y T_0 respectivamente pueden ser descrita por el coeficiente de transferencia de calor h_i y h_0 de forma que la transferencia de calor por unidad de área es $h_i(T_r - T_i)$ y $h_0(T_0 - T_c)$ respectivamente.

Hipótesis 4. La capacidad calorífica de la mezcla que reacciona no cambia significativamente con la temperatura.

Hipótesis 5. El sistema está en estado estacionario.

Hipótesis 6. La curvatura de la pared es despreciable y las esquinas pueden ser ignoradas.

Hipótesis 7. La conductividad de la pared del reactor es extremadamente alta.

Hipótesis 8. La capacidad calorífica de la pared del reactor es despreciable.

Hipótesis 9. La respuesta de la chaqueta de enfriamiento es virtualmente instantánea.

Hipótesis 10. La reacción es de primer orden e irreversible con respecto a los ejes espaciales.

3.2.2 Planteamiento del modelo matemático

Usando el principio de la conservación de materia como principio rector (Hipótesis 0) nosotros tenemos el siguiente balance para cada especie:

$$\left[\begin{array}{l} \text{velocidad de cambio} \\ \text{del número de moles} \\ \text{de } A_j \text{ en el reactor} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{velocidad de} \\ \text{alimentación} \\ \text{de } A_j \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{velocidad de} \\ \text{remoción} \\ \text{de } A_j \end{array} \right] + \left[\begin{array}{l} \text{velocidad de formación} \\ \text{de } A_j \text{ por causa} \\ \text{de la reacción} \end{array} \right]$$

Este balance de materia se expresa por medio de la siguiente ecuación diferencial ordinaria:

$$\frac{d}{dt} \sum_{j=1}^m A_j = \frac{q_j}{V_f} \sum_{j=1}^m A_{jf} - \frac{q}{V} \sum_{j=1}^m A_j - \sum_{j=1}^m \mathbf{a}_j r(A_1, \dots, A_m, T_r) \quad (3.2.1)$$

Como el sistema se encuentra en estado estacionario (Hipótesis 5) entonces: $q_f = q$ y por lo mismo $V \rightarrow \text{constante}$, y como el volumen del reactor se encuentra bien agitado (Hipótesis 1) la concentración en todo el reactor es igual a $C_j = \frac{A_j}{V}$. De lo anterior

derivamos el siguiente resultado:

$$V \frac{d}{dt} \sum_{j=1}^m C_j = q \sum_{j=1}^m (C_{jf} - C_j) - \sum_{j=1}^m \mathbf{a}_j V r(C_1, \dots, C_m, T_r) \quad (3.2.2)$$

Utilizando el principio de conservación de energía (Hipótesis 0) tenemos el siguiente balance de energía en todo el volumen del reactor.

$$\left[\begin{array}{l} \text{Acumulación de} \\ \text{calor en el volumen} \\ \text{del reactor} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{Calor que entra} \\ \text{al reactor con} \\ \text{la alimentación} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{Calor que sale} \\ \text{del reactor con} \\ \text{los productos} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{Calor removido} \\ \text{del reactor por} \\ \text{intercambio} \end{array} \right]$$

Como el volumen del reactor se encuentra perfectamente mezclado (Hipótesis 1) la temperatura en todo el reactor es T_r , y por lo tanto el balance anterior lo podemos expresar matemáticamente de la siguiente forma:

$$\frac{d}{dt} V \sum_{j=1}^m C_j h_j(T_r) = q \sum_{j=1}^m C_{jf} h_j(T_{rf}) - q \sum_{j=1}^m C_j h_j(T_r) - a_i h_i(T_r - \bar{T}_i) \quad (3.2.3)$$

Derivando el término izquierdo de la ecuación (3.2.3), tenemos que:

$$\frac{d}{dt} V \sum_{j=1}^m C_j h_j(T_r) = V \left[\sum_{j=1}^m h_j(T_r) \frac{d}{dt} \sum_{j=1}^m C_j + \sum_{j=1}^m C_j \frac{d}{dt} \sum_{j=1}^m h_j(T_r) \right] \quad (3.2.4)$$

Recordando la ecuación (3.2.2) e incorporándola a (3.2.4), tenemos, que:

$$\frac{d}{dt} V \sum_{j=1}^m C_j h_j(T_r) = q \sum_{j=1}^m C_{jf} h_j(T_r) - q \sum_{j=1}^m C_j h_j(T_r) - V \sum_{j=1}^m \mathbf{a}_j h_j(T_r) r(C_1, \dots, C_m, T_r) + V \sum_{j=1}^m C_j \frac{d}{dt} \sum_{j=1}^m h_j(T_r) \quad (3.2.5)$$

Igualando el balance de energía (Ecuación (3.2.3)), resulta:

$$V \sum_{j=1}^m C_j \frac{d}{dt} \sum_{j=1}^m h_j(T_r) = q \sum_{j=1}^m C_{jf} \left[\sum_{j=1}^m h_j(T_{rf}) - \sum_{j=1}^m h_j(T_r) \right] + V \sum_{j=1}^m \mathbf{a}_j h_j(T_r) r(C_1, \dots, C_m, T_r) - a_i h_i(T_r - \bar{T}_i) \quad (3.2.6)$$

Y considerando que las capacidades caloríficas de la mezcla no cambian significativamente con la temperatura (hipótesis 4), podemos decir, que:

$$d \sum_{j=1}^m h_j(T_r) = \sum_{j=1}^m C_{pj} dT_r \quad (3.2.7)$$

$$\sum_{j=1}^m h_j(T_r) = \sum_{j=1}^m h_{jR} - \sum_{j=1}^m C_{pj} (T_R - T_r) \quad (3.2.8)$$

$$\sum_{j=1}^m h_j(T_{rf}) = \sum_{j=1}^m h_{jR} - \sum_{j=1}^m C_{pj} (T_R - T_{rf}) \quad (3.2.9)$$

$$\sum_{j=1}^m \mathbf{a}_j h_j(T_r) = (-\Delta H_R(T_r)) \quad (3.2.10)$$

Y que:
$$\sum_{j=1}^m C_j = \sum_{j=1}^m C_{jf} = \mathbf{r} \quad (3.2.11)$$

Entonces la ecuación de transporte de energía en el reactor queda de la siguiente forma:

$$\mathbf{r} V \sum_{j=1}^m C_{pj} \frac{dT_r}{dt} = q \mathbf{r} \sum_{j=1}^m C_{pj} (T_f - T_r) + (-\Delta H) V r(C_1, \dots, T_r) - a_i h_i(T_r - \bar{T}_i) \quad (3.2.11)$$

Utilizando el principio de conservación de energía, Hipótesis 0, tenemos el siguiente balance de energía en todo el volumen de la chaqueta de enfriamiento.

$$\left[\begin{array}{l} \text{Acomulacion de} \\ \text{calor en el volumen} \\ \text{de la chaqueta} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{Calor que entra} \\ \text{a la chaqueta con} \\ \text{la alimentacion} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{Calor que sale} \\ \text{de la chaqueta} \\ \text{con la salida} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{Calor ganado} \\ \text{del reactor por} \\ \text{intercambio} \end{array} \right]$$

Como el volumen de la chaqueta se encuentra perfectamente mezclado, hipótesis 1, la temperatura en toda la chaqueta es T_c , y por lo tanto el balance anterior lo podemos expresar matemáticamente de la siguiente forma:

$$V_c \frac{dh_j(T)}{dt} = q_c [h_c(T_{cf}) - h_c(T_c)] + a_0 h_0 (\bar{T}_0 - T_c) \quad (3.2.12)$$

Usando igualdades análogas a las de las ecuaciones (3.2.7) y (3.2.8), tenemos que la ecuación anterior toma la siguiente forma:

$$V_c C_{pc} \frac{dT_c}{dt} = q_c C_{pc} (T_{cf} - T_c) + a_0 h_0 (\bar{T}_0 - T_c) \quad (3.2.13)$$

Tómese como cierto las siguientes igualdades, que por cuestiones que no corresponde a este trabajo de tesis, no se demuestran:

$$AU (T_r - T_c) = a_0 h_0 (T_c - \bar{T}_0) = a_i h_i (T_r - \bar{T}_i) \quad (3.2.14)$$

Sustituyendo la relación (3.2.14) en las ecuaciones de diseño del reactor (3.2.11) y (3.2.13) y manejándolas algebraicamente, estas toman la siguiente forma:

$$\frac{dC}{dt} = \mathbf{q} (C_f - C) - \mathbf{a} r \quad (3.2.15)$$

$$\frac{dT_r}{dt} = \mathbf{q} (T_{rf} - T_r) + \mathbf{b} r - \mathbf{g} (T_r - T_c) \quad (3.2.16)$$

$$\frac{dT_c}{dt} = \mathbf{q}_c (T_{cf} - T_c) + \mathbf{g}_c (T_r - T_c) \quad (3.2.17)$$

En donde:

$$\mathbf{q} = \frac{q}{V} \quad \mathbf{b} = \frac{(-\Delta H_r)}{\mathbf{r} \sum_{j=1}^m C_{pj}} \quad \mathbf{g} = \frac{AU}{\mathbf{r}V \sum_{j=1}^m C_{pj}} \quad \mathbf{q}_c = \frac{q_c}{V_c} \quad \mathbf{g}_c = \frac{AU}{V_c C_{pc}}$$

3.2.3 Parámetros e información del caso específico

La reacción que se considera es:



Ecuación Cinética: $r_A = k_0 e^{-\frac{E_a}{R T_r}} C_A$ (3.2.18)

Balance de Materia: $\dot{C}_A = \mathbf{q} (C_{Af} - C_A) - r_A$ (3.2.19)

Balance de Energía: $\dot{T}_r = \mathbf{q} (T_{rf} - T_r) + \mathbf{b} r_A - \mathbf{g} (T_r - T_j)$ (3.2.20)

Parámetros del Reactor y la Cinética:

$$\frac{E_a}{R} = 10,000 \text{ K}$$

$$k_0 = e^{25}$$

$$\mathbf{b} = 200 \frac{\text{L K}}{\text{mol}}$$

$$\mathbf{q} = 1 \text{ s}^{-1}$$

$$\mathbf{g} = 1 \text{ s}^{-1}$$

$$T_j = 350 \text{ K}$$

$$T_{rf} = 350 \text{ K}$$

$$C_{Af} = 1 \frac{\text{mol}}{\text{m}^3}$$

3.2.4 Comportamiento a lazo abierto

En esta sección se ve la dinámica estable e inestable, a lazo abierto, del CSTR a las condiciones de la sección 3.2.3 y a diferentes temperaturas de la chaqueta de enfriamiento, se presenta también el retrato de los estados estacionarios y el retrato fase.

En la Figura 3.2.2 se muestra la dinámica estable de la concentración y la temperatura del CSTR, a lazo abierto, a las condiciones que se establecen en la sección 3.2.3 y una temperatura en la chaqueta de $T_c = 368.0 K$, hasta abandonar el transitorio.

En la Figura 3.2.3 se muestra la dinámica inestable de la concentración y la temperatura del CSTR, a lazo abierto, a las condiciones de la sección 3.2.3, a una temperatura en la chaqueta de enfriamiento de $T_c = 368.4 K$, en esta Figura se puede ver que al acercarse a la temperatura del reactor de $400 K$, la respuesta del sistema es oscilatoria, esto por ser la temperatura de $400 K$ un punto inestable del sistema.

El retrato de los estados estacionarios, Figura 3.2.4, a las condiciones que se establecen en la sección 3.2.3, se puede ver que al acercarse a la temperatura en la chaqueta de enfriamiento de $T_c = 368.4 K$ se da una discontinuidad en el retrato de los estados estacionarios, esto debido que alrededor de esta temperatura de la chaqueta de enfriamiento se localiza un estado estacionario inestable ($T = 400 K, C = 0.5$) y por lo mismo el sistema no se puede establecer en ese estado estacionario.

En el retrato fase, Figura 3.2.5, realizado a las condiciones de la sección 3.2.3 y una temperatura de la chaqueta de enfriamiento de $T_c = 368.0 K$, se puede apreciar que las variables llegan al primer punto de equilibrio, siempre y cuando las condiciones iniciales estén antes del punto inestable.

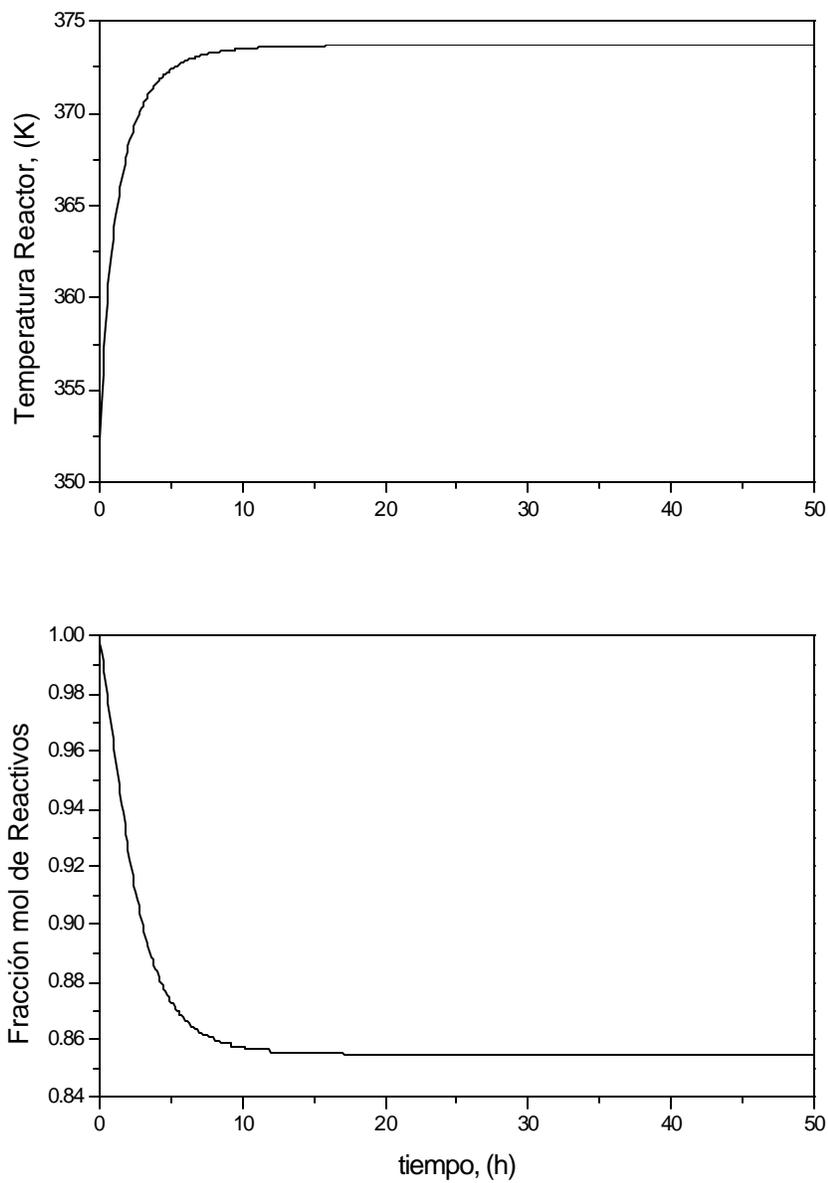


Figura 3.2.2 Dinámica estable de la concentración y de la temperatura del CSTR (a lazo abierto) a las condiciones de alimentación de la sección 3.2.3 y una $T_c = 368.0 K$

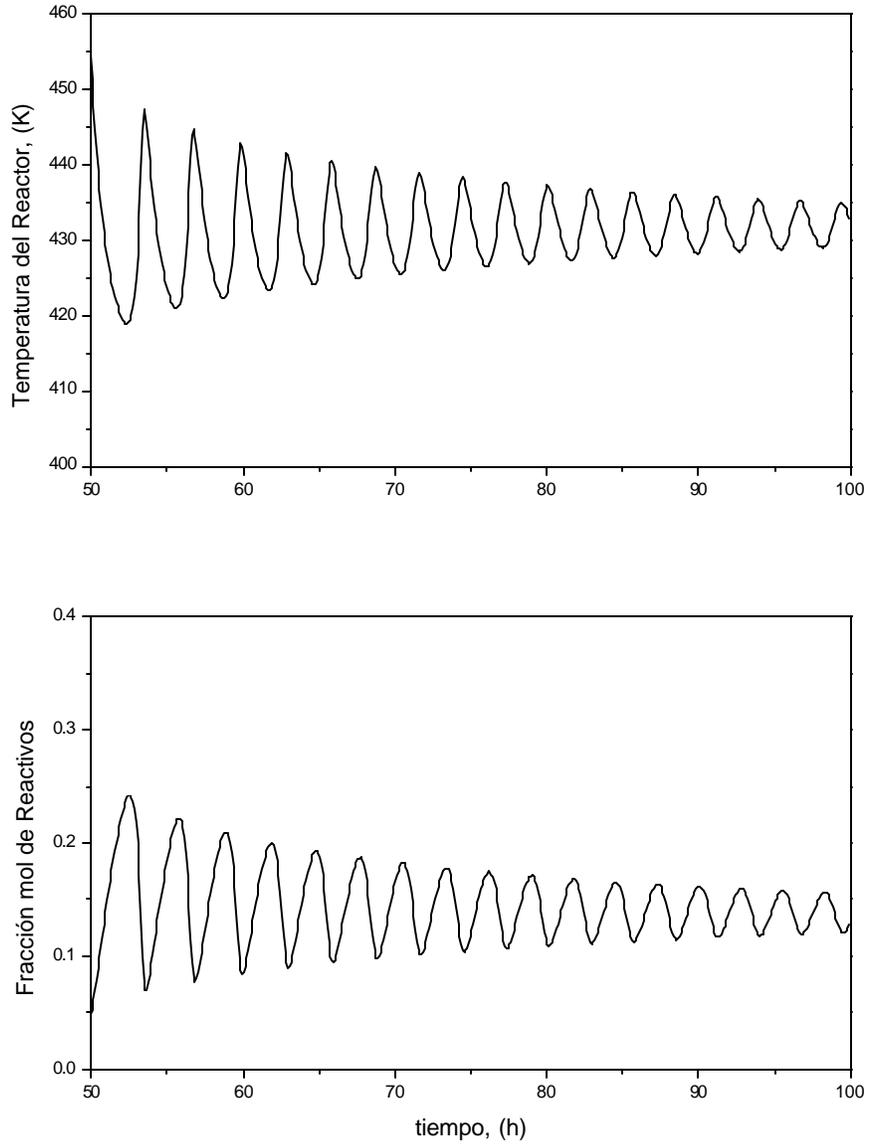


Figura 3.2.3 Dinámica inestable de la concentración y de la temperatura del CSTR (a lazo abierto) a las condiciones de alimentación de la sección 3.2.3 y una $T_c = 368.4 K$

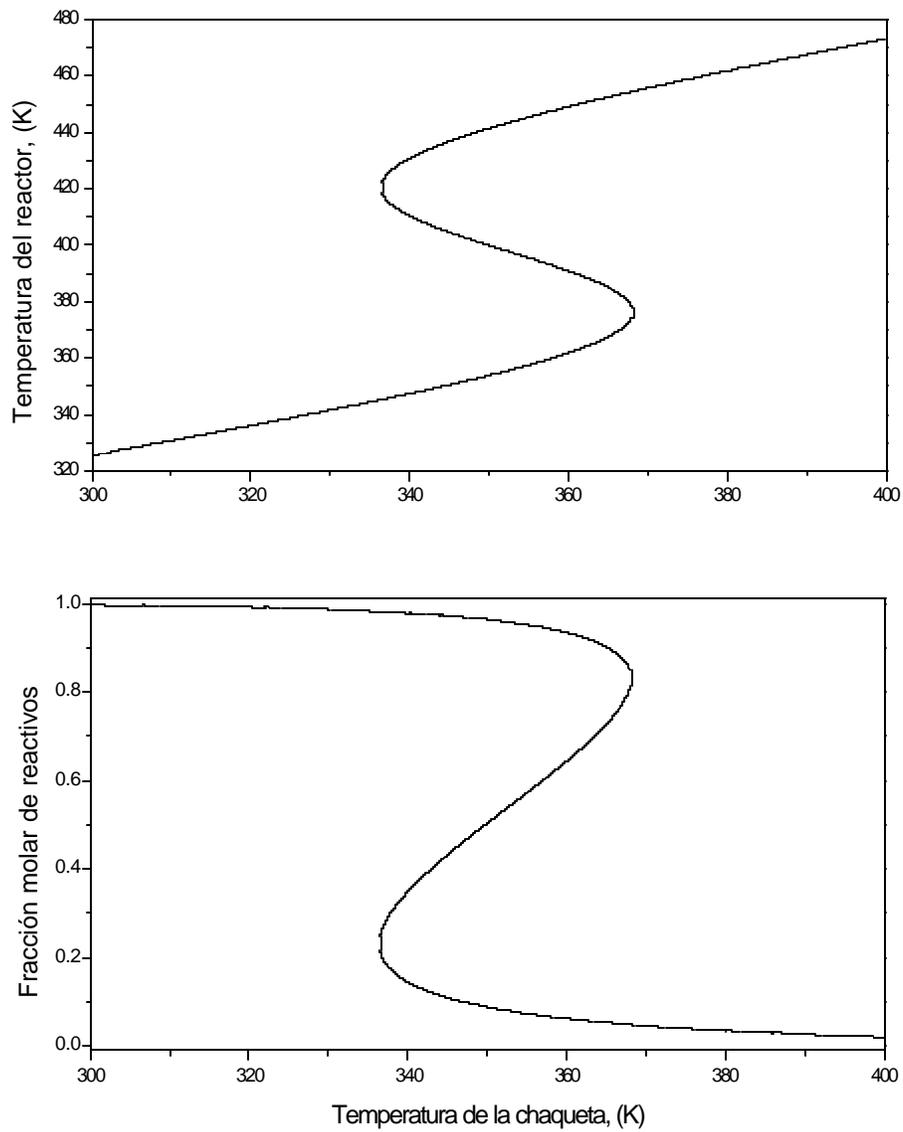


Figura 3.2.4 Histéresis de los puntos de equilibrio del CSTR (a lazo abierto) a las condiciones de alimentación de la sección 3.2.3

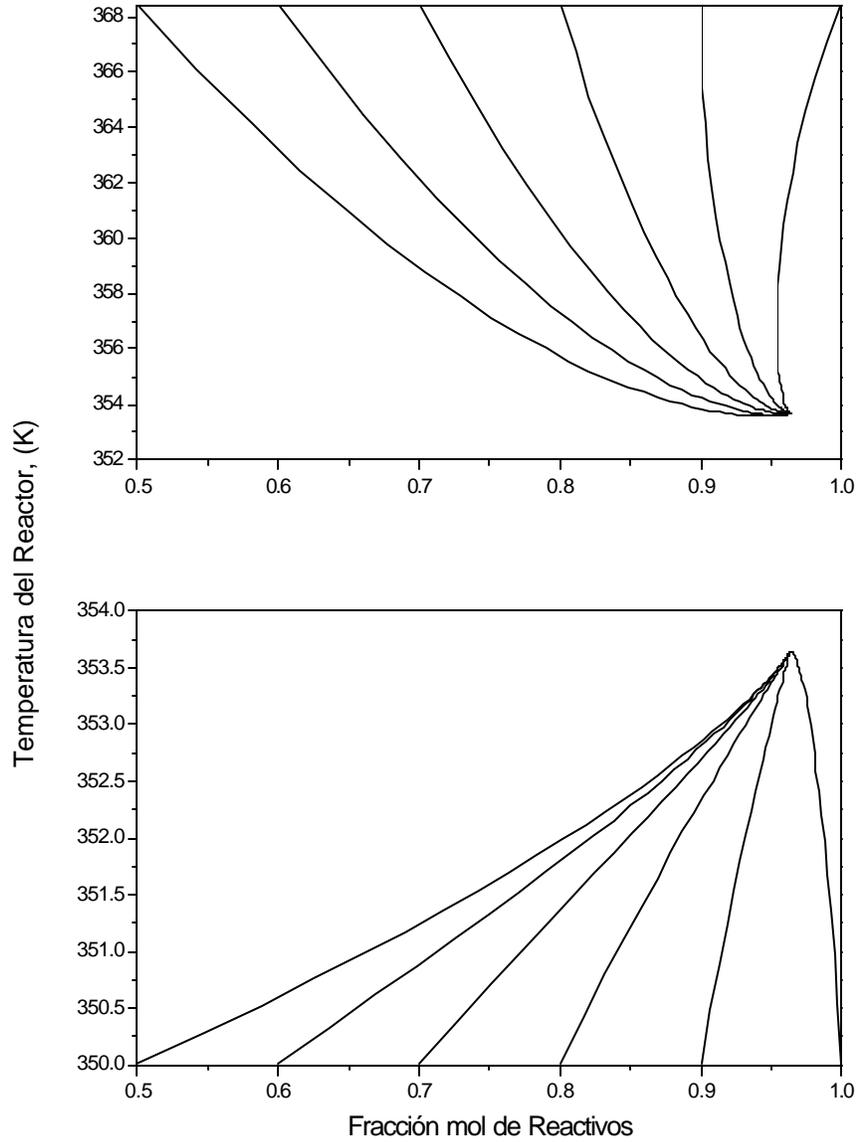


Figura 3.2.5 Retrato fase del CSTR (a lazo abierto) a las condiciones de alimentación de la sección 3.2.3 y una $T_c = 368.0 K$, cambiando las condiciones iniciales de operación

Capítulo 4

Simulaciones Numéricas

En este capítulo se llevan a cabo las simulaciones numéricas del reactor de lecho fluidizado y del reactor continuo de tanque agitado bajo la influencia de los esquemas de control propuestos para estos reactores. Se presentan también los resultados obtenidos al afectar al sistema controlado con cambios del punto de operación, perturbaciones de la temperatura y de la concentración de alimentación de los reactivos que entran al reactor.

En los esquemas de control simulados (NPI y PI) se aplicó una saturación en la variable a manipular, esto para poder apegar la respuesta del controlador a la realidad física, ya que una válvula de flujo no puede ser abierta más del 100 % o menos del 0 % de su capacidad real, por lo mismo es necesario saturar el valor de la variable a manipular apegados en primera instancia en principios físicos y en instancias subsecuentes en otros principios. Aunque el saturar la variable a manipular en limitar la respuesta del esquema de control esto es necesario no solo por cuestiones de apego a la realidad sino también por una cuestión de ética.

4.1 Reactor Lecho Fluidizado

Las simulaciones que se realizaron para el modelo matemático del FBR que se presenta en la sección 3.1.2, fueron la dinámica a lazo abierto y de la cual se trata y se muestran sus resultados en la sección 3.1.4. A continuación se prueban los esquemas de control que se vieron en las secciones 2.2 y 2.3 en el modelo matemático del FBR a través de simulaciones numéricas, el objetivo de control es regular la concentración de anhídrido maleico a la salida del reactor, manipulando la velocidad del flujo volumétrico que entra en la chaqueta de enfriamiento. Para las simulaciones a lazo cerrado de este reactor se aplica una saturación a los esquemas de control limitando el flujo de la alimentación a la chaqueta de enfriamiento entre el intervalo de 0.1 a 1.0

4.1.1 Control de composición de anhídrido maleico

Para la simulación numérica de este sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden se utiliza la aproximación de Runge Kutta de cuarto orden, con un intervalo de integración de $dt = 0.015$ s

El lazo de control en todas las simulaciones de este reactor se activa después de eliminar el efecto transitorio inicial, después de 0.5 minutos. Los métodos utilizados para el sintonizado de los dos esquemas de control se encuentran en los apéndices A.2.1 y A.2.2

Control PI Convencional

El sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden y el esquema de control PI en el espacio de estado y estrictamente invariantes en el tiempo, están dadas por:

$$\dot{x}(t) = f(t) + Bu(t) \quad x(0) = \mathbf{q}_n$$

$$u(t) = k_p e(t) + k_I I(t)$$

$$\dot{I}(t) = e(t) \quad I(0) = 0$$

$$e(t) = (x_s - x(t))$$

En donde: $x \in \mathfrak{R}^{n \times 1}$ es el vector de las variables de estado
 $f(t) \in \mathfrak{R}^{m \times 1}$ es el vector de las partes no lineales del sistema
 $B \in \mathfrak{R}^{n \times 1}$ es una matriz constante
 $u(t) \in \mathfrak{R}^{1 \times 1}$ es la señal de salida del controlador
 $e(t)$ es el error relativo al punto de operación deseado

Los resultados al implementar el esquema de control PI se presentan en la Figura 4.1.1; En esta Figura se pueden apreciar los resultados de un control PI convencional con un sintonizado rígido, esto con el fin de intensificar la respuesta del controlador lo más posible sin llegar a provocar inestabilidades en el sistema a regular.

En otra simulación (Figura 4.1.2) se prueba el esquema de control con un cambio en el punto de operación (de 0.7 a 0.77 %_{molar} de AM) en el tiempo de 40 minutos. Esta Figura nos muestra una muy buena respuesta del esquema PI convencional con un buen tiempo de control y muy poca desviación del punto de operación deseado.

En una nueva simulación, Figura 4.1.3, se prueba el esquema de control con una perturbación de la concentración de alimentación (de 2.0 a 2.5 %_{molar} de AM) a los 40 minutos de simulación. En esta Figura se puede apreciar que cuando se da un valor de 0.1 a \mathbf{a} , la respuesta del esquema PI convencional (ante perturbaciones de la concentración de alimentación al reactor) es bastante buena, pero cuando \mathbf{a} toma valores mayores a 0.5 empieza a presentar respuestas lentas y por ende una mala regulación.

Realizando otra simulación se prueba el esquema de control con una perturbación de la temperatura de alimentación del reactor (de 633.1 a 600.0 K) a los 40 minutos de simulación, como se muestra en la Figura 4.1.4. En este caso la respuesta del esquema de control PI convencional es buena, pero como se explica en otras de las simulaciones, sólo cuando el valor de \mathbf{a} es próximo a 0.1, se tienen desempeños poco eficaces cuando \mathbf{a} supera el valor de 0.5

Las simulaciones a lazo cerrado se realizan para tres valores de \mathbf{a} y puede observarse que para valores muy pequeños de \mathbf{a} , el comportamiento a lazo cerrado presenta oscilaciones, y para valores altos de \mathbf{a} se presenta una respuesta lenta.

Control NPI

El sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden y el esquema de control NPI en el espacio de estado y estrictamente invariantes en el tiempo, están dadas por:

$$\begin{aligned} \dot{\mathbf{x}}(t) &= \mathbf{f}(\mathbf{t}) + \mathbf{B}u(t) & \mathbf{x}(0) &= \mathbf{q}_n \\ u(t) &= k_i \mathbf{z}(t) + \left[k_p + g_p e^{I|e(t)|} \right] e(t) \\ \dot{\mathbf{z}}(t) &= \frac{e(t)}{1 + \mathbf{m}^2 e^2(t)}, & \mathbf{z}(0) &= 0 \end{aligned}$$

Los resultados al implementar el esquema de control NPI se presentan en la Figura 4.1.5, como se puede apreciar en esta Figura, cuando el valor de a crece la respuesta del esquema de control es más lenta y la regulación del sistema se retrasa, en esta Figura se puede ver claramente que la respuesta del esquema NPI es suficientemente buena aun para valores de a relativamente altos, pero si se hace muy pequeño el valor de a , la respuesta del esquema de control inestabiliza al sistema teniendo oscilaciones de la variable a controlar.

En otra simulación, Figura 4.1.6, se prueba el esquema de control con un cambio en el punto de operación (de 0.7 a 0.77 %_{molar} de AM) en el tiempo de 15 minutos. En esta Figura podemos apreciar una respuesta aceptable del esquema de control NPI, ya que se llega al nuevo punto de operación de forma rápida y sin desviarnos mucho de nuestro objetivo de control, teniendo bajo condiciones de sintonizado similares un mejor desempeño que el presentado por el esquema PI convencional.

En una nueva simulación (Figura 4.1.7) donde se prueba el esquema de control con una perturbación de la concentración de alimentación (de 2.0 a 2.5 %_{molar} de AM) a los 15 minutos de simulación. En esta Figura vemos un desempeño relativamente bueno en comparación con el que presenta el esquema PI convencional, siendo estos dos esquemas de control sintonizados de la misma forma.

La Figura 4.1.8, muestra los resultados de otra simulación donde se prueba el esquema de control con una perturbación de la temperatura de alimentación del reactor (de 633.1 a 600.0 K) a los 15 minutos de simulación. En esta Figura se aprecia que el esquema de control responde más rápido y se desvía menos del punto de operación deseado que el esquema PI convencional -esto claro bajo las mismas condiciones de sintonizado- ya que no se podría comparar este esquema de control con el PI convencional si estuvieran sintonizados de forma diferente, puesto que de esa forma podríamos incrementar la ganancia proporcional en alguno de los esquemas con el fin de intensificar la respuesta y hacer aparentar que un esquema funciona mejor que el otro.

Las simulaciones a lazo cerrado se realizan para tres valores de a y como puede observarse que entre mayor sea a , el comportamiento a lazo cerrado presenta una respuesta más lenta que para valores cercanos a 0.1

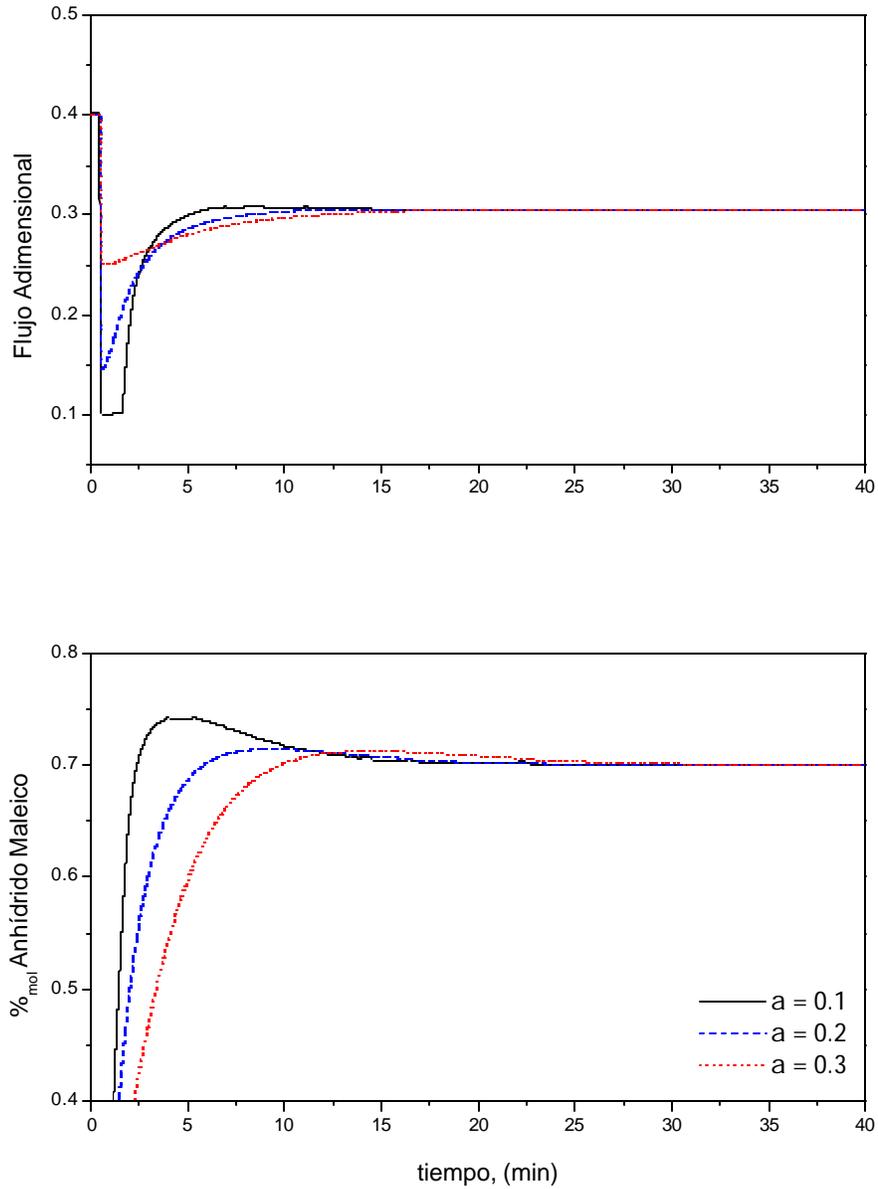


Figura 4.1.1 Reactor de Lecho Fluidizado, control PI convencional, a diferentes valores de a

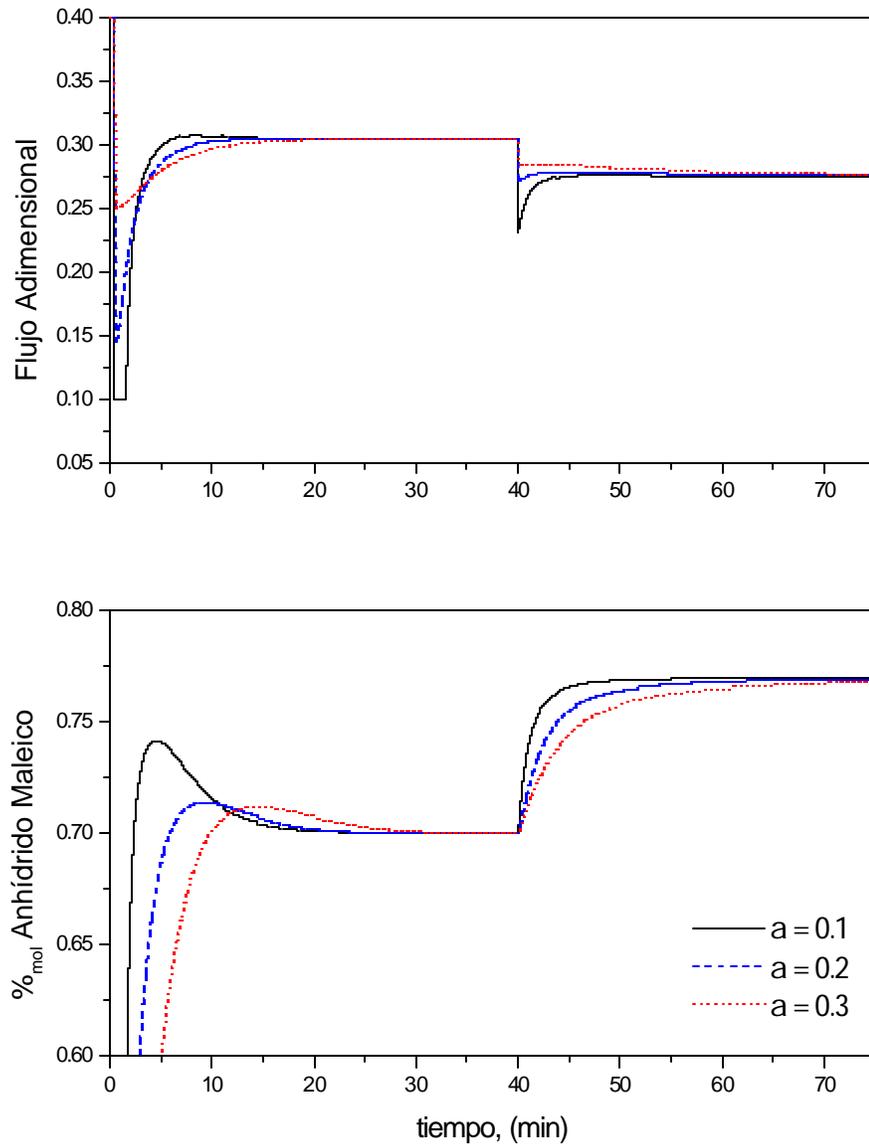


Figura 4.1.2 Reactor de Lecho Fluidizado, control PI convencional, efecto del cambio del punto de operación

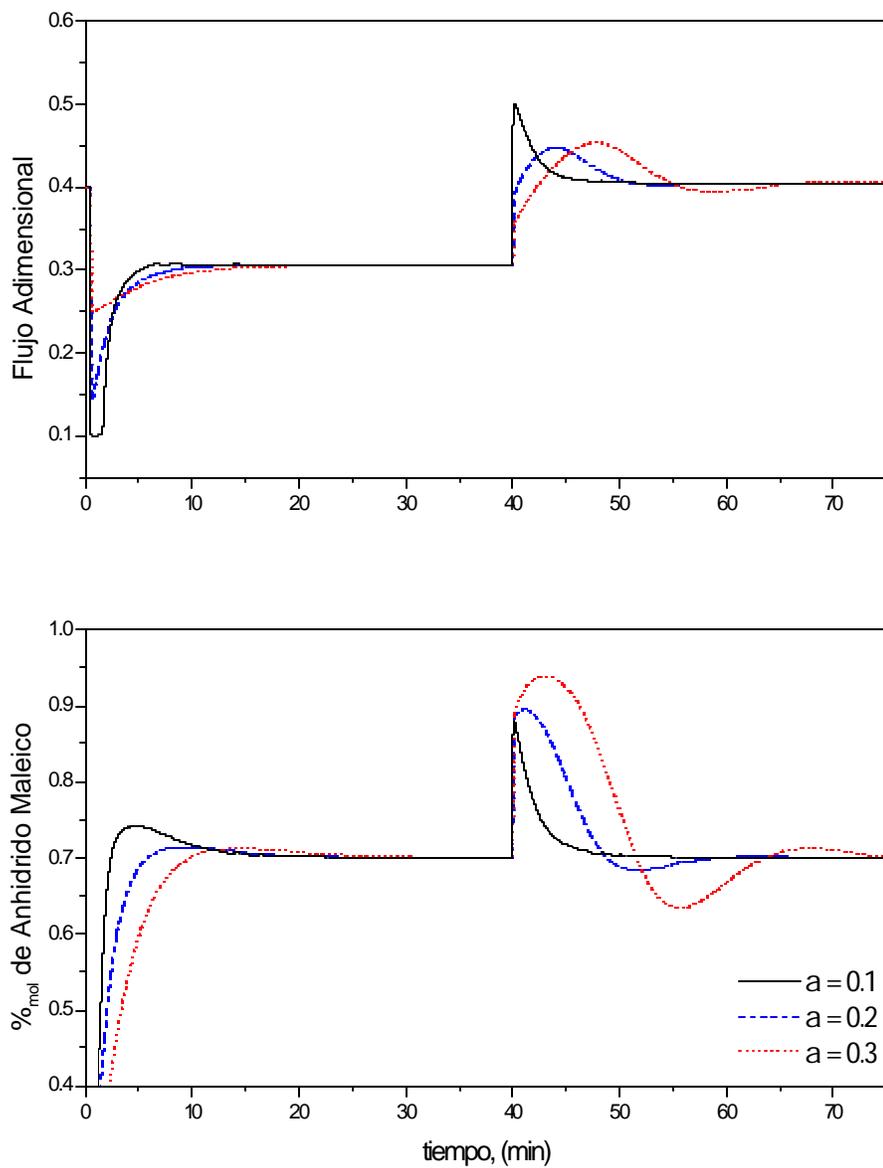


Figura 4.1.3 Reactor de Lecho Fluidizado, control PI convencional, efecto de una perturbación de la concentración de alimentación al reactor

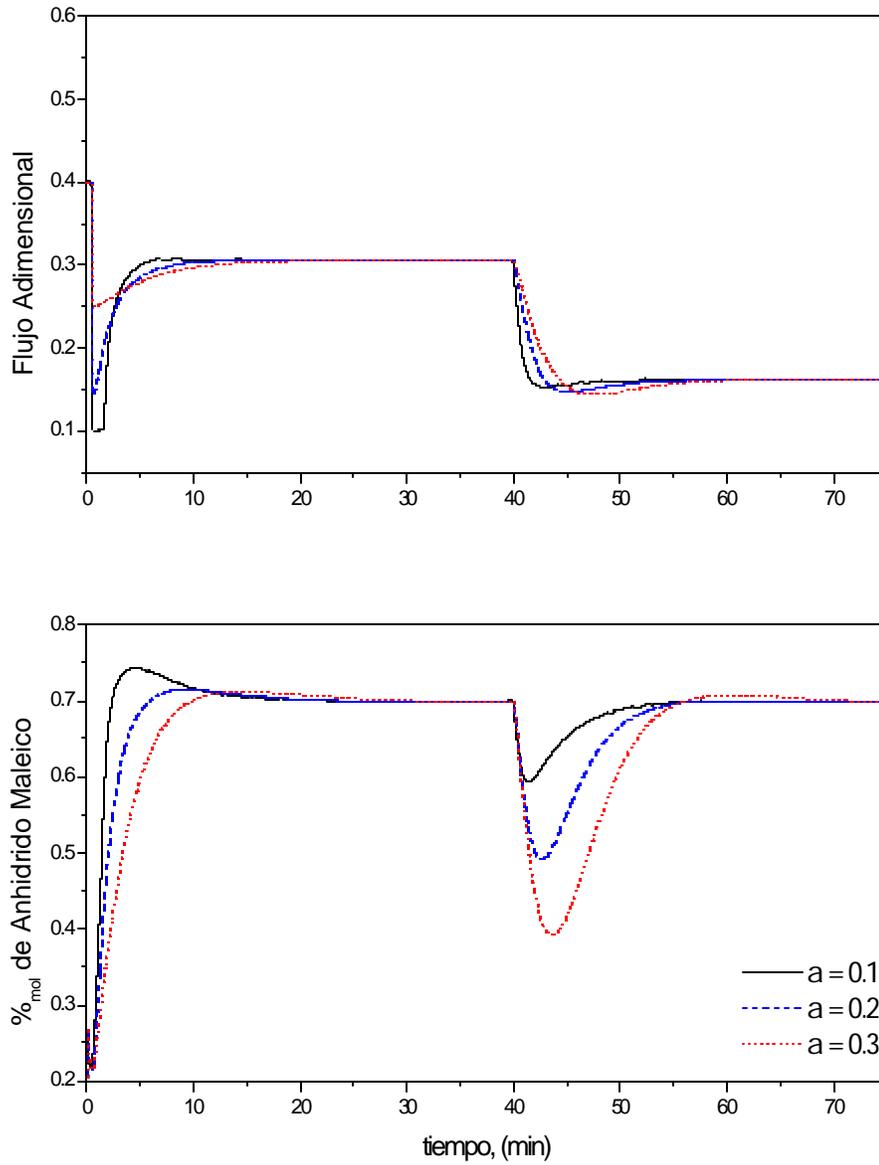


Figura 4.1.4 Reactor de Lecho Fluidizado, control PI convencional, efecto de una perturbación en la temperatura de la alimentación al reactor

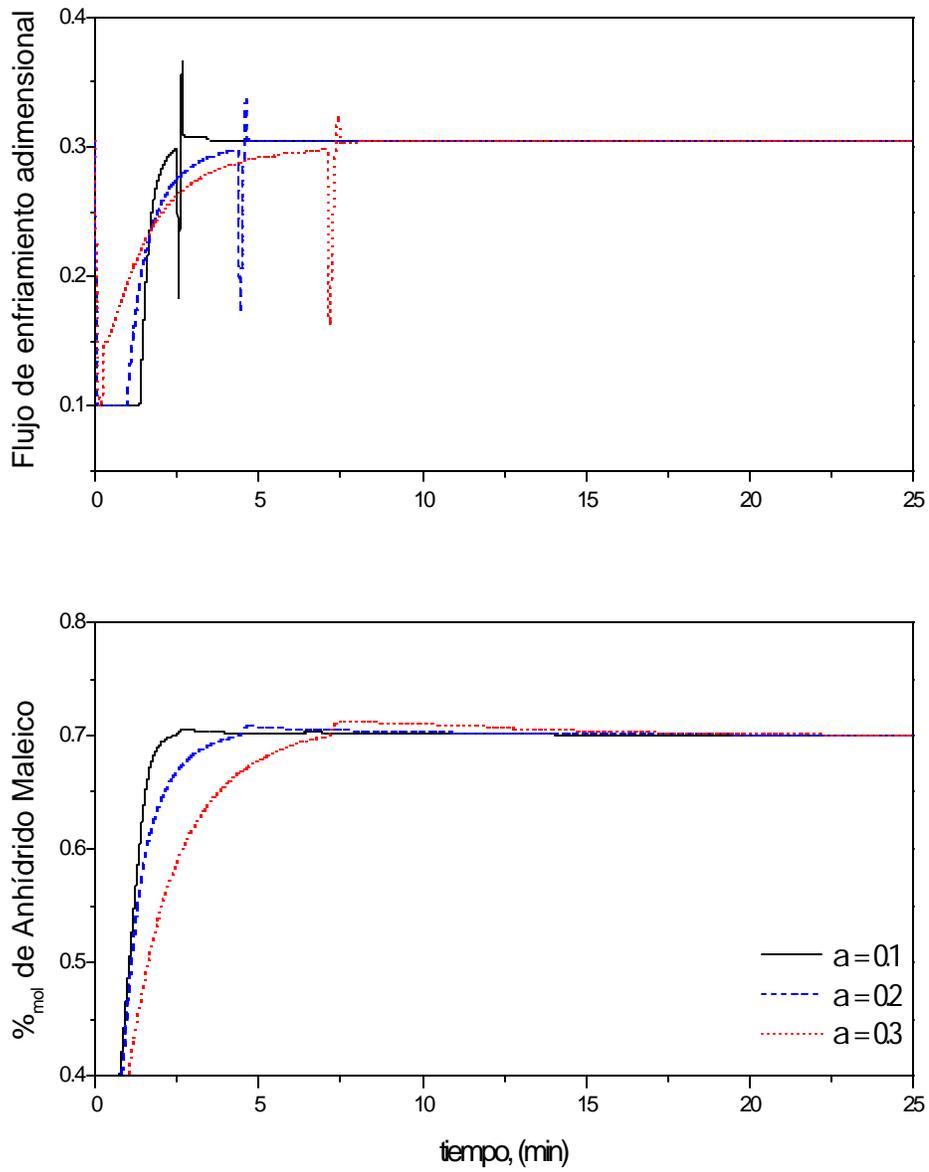


Figura 4.1.5 Reactor de Lecho Fluidizado, control NPI, a diferentes valores de a

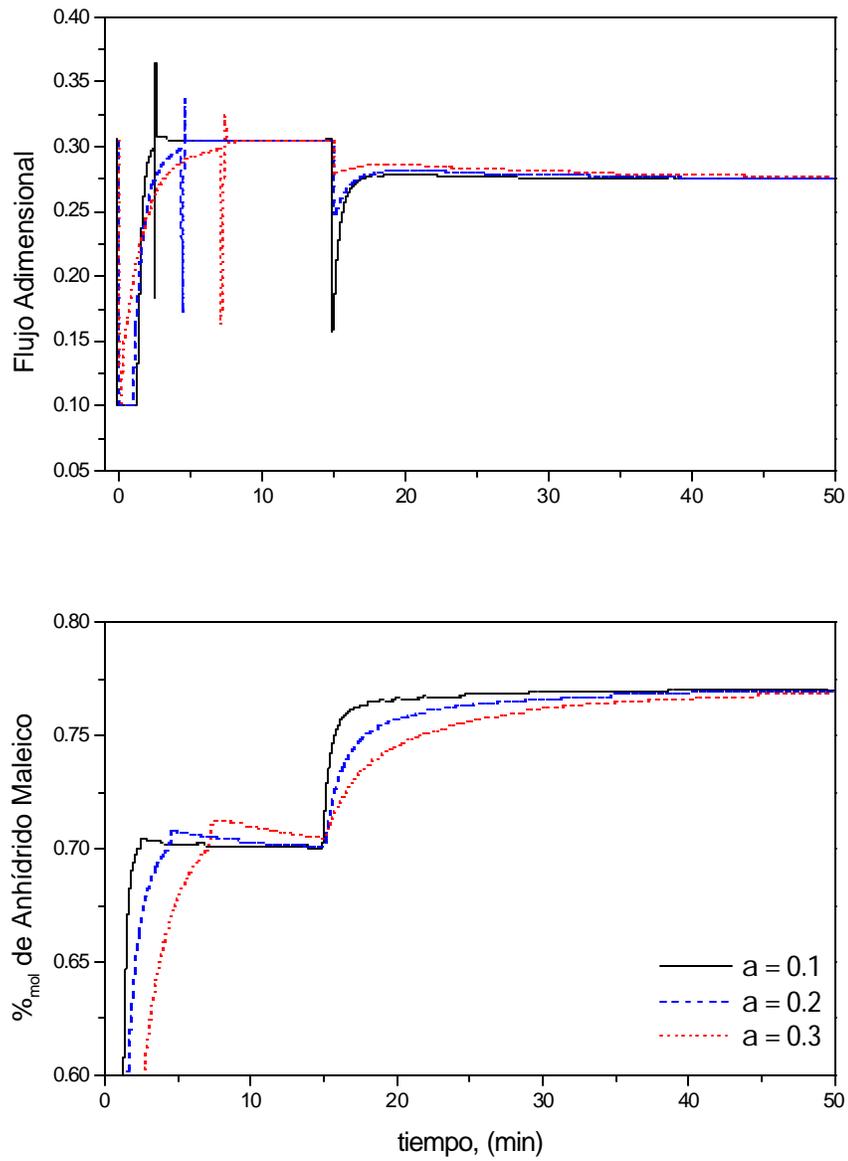


Figura 4.1.6 Reactor de Lecho Fluidizado, control NPI, efecto del cambio del punto de operación

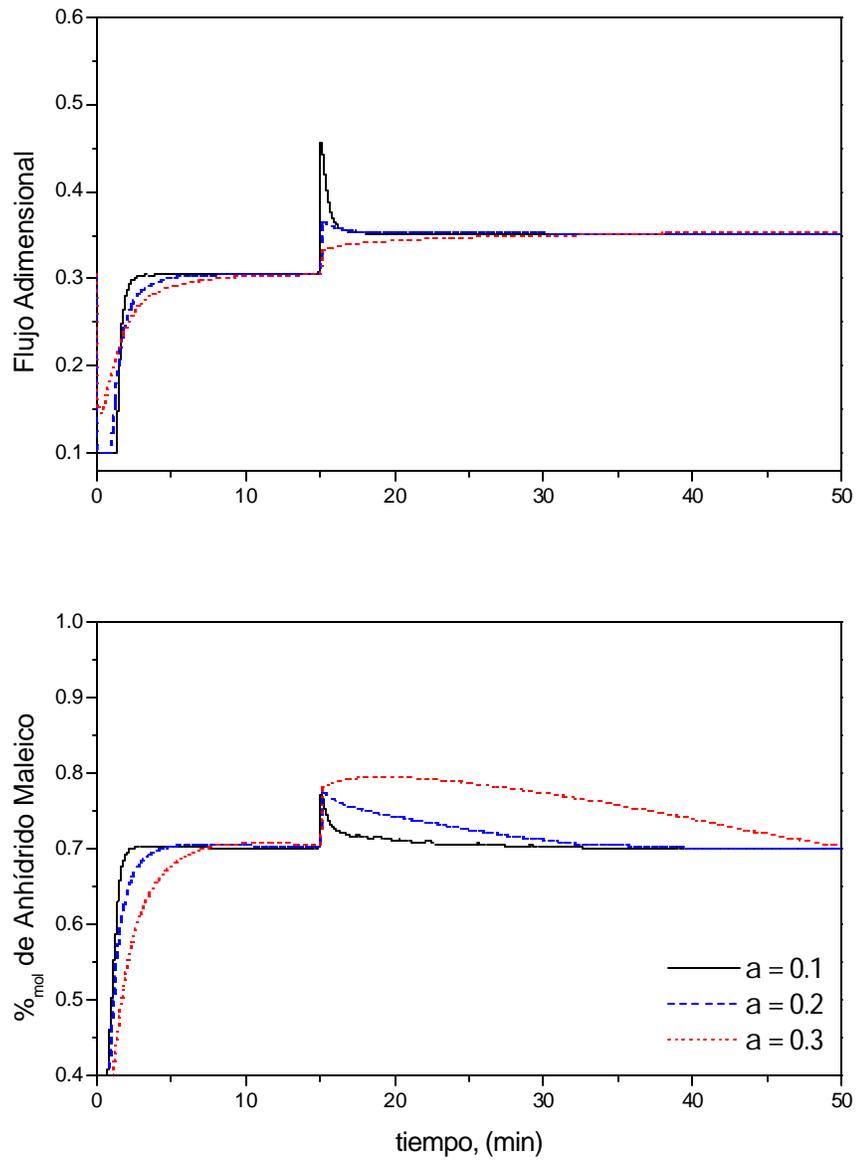


Figura 4.1.7 Reactor de Lecho Fluidizado, control NPI, efecto de una perturbación de la concentración de alimentación al reactor

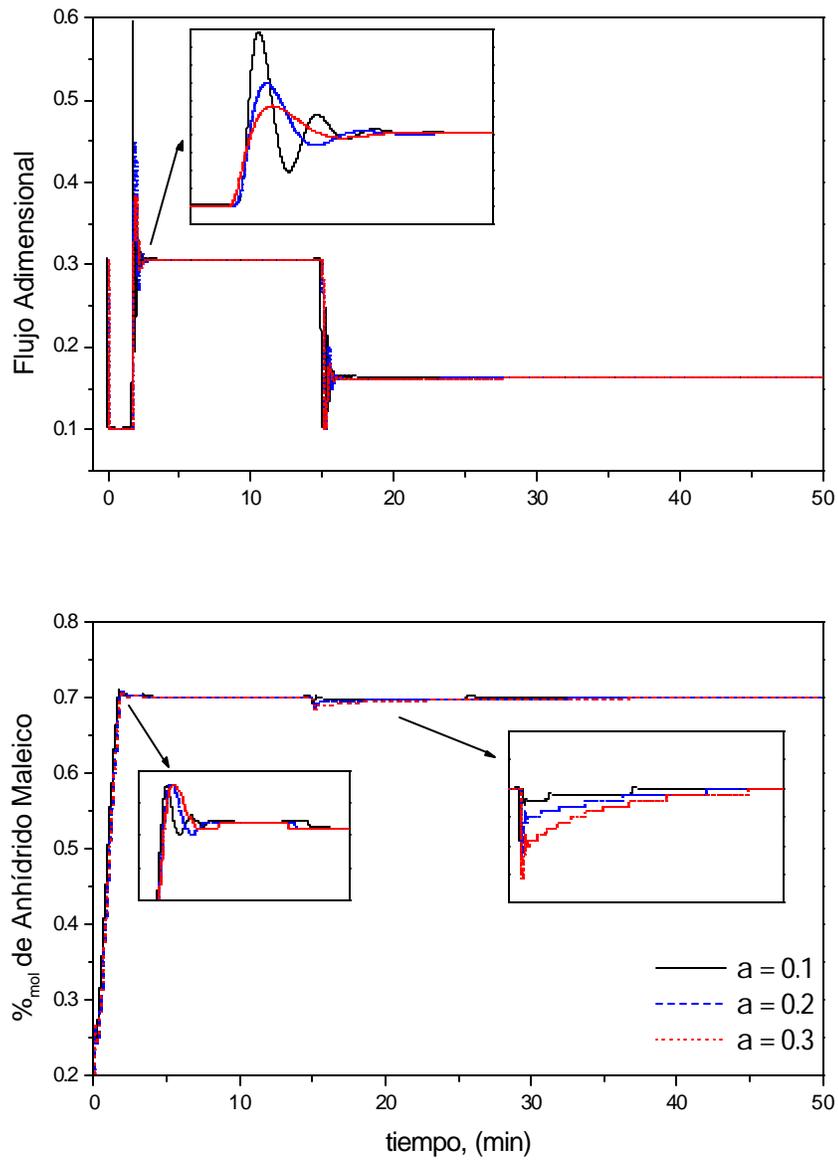


Figura 4.1.8 Reactor de Lecho Fluidizado, control NPI, efecto de una perturbación en la temperatura de la alimentación al reactor

4.1 Reactor Continuo de Tanque Agitado

Las simulaciones que se realizaron para el modelo matemático del CSTR que se muestra en la sección 3.2.2, fueron la dinámica a lazo abierto, y de la cual se habla y se muestran sus resultados en la sección 3.2.4, pero en esta sección se prueban los esquemas de control que se vieron en la sección 2.2 y 2.3 en el modelo matemático del CSTR a través de simulaciones numéricas; el objetivo de control es regular la temperatura del reactor manipulando la temperatura de la chaqueta de enfriamiento, considerando que la temperatura de la chaqueta de enfriamiento es manipulada por el flujo de agua de enfriamiento que entra a la chaqueta. Para las simulaciones a lazo cerrado de este reactor se aplica una saturación a los esquemas de control limitando la temperatura de la chaqueta de enfriamiento entre el intervalo de 250 K a 600 K.

4.2.1 Control de la temperatura del reactor

Para la simulación numérica de este sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden se utiliza la aproximación de Runge Kutta de cuarto orden, con un intervalo de integración de $dt = 3.6 \text{ s}$.

El lazo de control en todas las simulaciones de este reactor se activa después de eliminar el efecto transitorio inicial, después de 5.0 horas. Los métodos utilizados para el sintonizado de los esquemas de control se encuentran en los apéndices A.2.1 y A.2.2

Control PI convencional

El sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden y el esquema de control PI en el espacio de estado y estrictamente invariantes en el tiempo están dadas por:

$$\dot{x}(t) = f(t) + Bu(t) \quad x(0) = \mathbf{q}_n$$

$$u(t) = k_p e(t) + k_I I(t)$$

$$\dot{I}(t) = e(t) \quad I(0) = 0$$

$$e(t) = (x_s - x(t))$$

Los resultados al implementar el esquema de control PI se presentan en la Figura 4.2.1; en esta Figura se puede apreciar el comportamiento de un esquema PI convencional clásico, el cual presenta una respuesta oscilatoria hasta llegar al punto de operación, estas oscilaciones se ven amplificadas y multiplicadas cuanto más grande hacemos el valor de a .

En la simulación mostrada en la Figura 4.2.2, se prueba el esquema de control con un cambio en el punto de operación (de 400 K a 420 K) en el tiempo de 20 horas. En esta Figura se observa que cuando el valor de a es de 0.1, presenta una respuesta oscilatoria pero hasta cierto punto aceptable y cuando establecemos valores de a mayores, la respuesta presenta más oscilaciones, con desviaciones del punto de operación deseado cada vez mayores.

En una nueva simulación, Figura 4.2.3, se prueba el esquema de control con una perturbación de la concentración de alimentación (de 1.0 a 0.90 fracción molar) a las 20 horas de simulación. En esta Figura se ve que la perturbación de la concentración del flujo de alimentación al reactor no afecta gravemente la regulación y que el desempeño del esquema ante esta perturbación es bueno, tomando en cuenta que el sistema no se desvía mucho del punto de operación deseado y presenta un tiempo de control relativamente bajo.

Realizando otra simulación, Figura 4.2.4, se prueba el esquema de control con una perturbación de la temperatura de alimentación del reactor (de 350 K a 400 K) a las 20 horas de simulación. En esta Figura se puede apreciar que la respuesta del esquema PI convencional es buena sólo cuando el valor de a es pequeño (de 0.25 o menor), pues cuando este valor se incrementa el sistema se vuelve inestable presentando un comportamiento oscilatorio creciente.

Las simulaciones a lazo cerrado se realizaron para tres valores de a y como puede observarse que para valores altos de a , el comportamiento a lazo cerrado presentó una respuesta lenta y hasta inestabilidades; mientras que para valores pequeños de a (de 0.1 a

0.3) se tienen respuestas aceptables por desviarnos relativamente poco del punto de operación y por presentar un tiempo breve de control.

Control NPI

El sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden y el esquema de control NPI en el espacio de estado, y estrictamente invariantes en el tiempo están dadas por:

$$\dot{x}(t) = f(t) + Bu(t) \quad x(0) = \mathbf{q}_n$$

$$u(t) = k_i z(t) + \left[k_p + g_p e^{I|e(t)|} \right] e(t)$$

$$\dot{z}(t) = \frac{e(t)}{1 + m^2 e^2(t)}, \quad z(0) = 0$$

$$e = (x_s - x)$$

Los resultados al implementar el esquema de control PI se presentan en la Figura 4.2.5. en esta Figura se ve un desempeño del esquema NPI más adecuado en comparación al presentado por el esquema PI convencional; esto se debe a que este esquema presenta tiempos de control y desviaciones del punto de operación menores a los presentados en el esquema PI.

En otra simulación, Figura 4.2.6, se prueba el esquema de control con un cambio en el punto de operación (de 400 K a 420 K) después de 15 horas. En esta Figura se puede apreciar una de las principales características del esquema de control NPI; esto es, llevar al sistema al punto de operación deseado sin necesidad de oscilaciones y en poco tiempo, esto en relación con el esquema PI convencional

En una nueva simulación, Figura 4.2.7, se prueba el esquema de control con una perturbación de la concentración de alimentación (de 1.0 a 0.90 fracción molar) a las 15 horas de simulación. En esta Figura se puede apreciar que el esquema NPI presenta un tiempo de control corto y pequeñas desviaciones del punto de operación, mostrando así un mejor desempeño que el esquema PI convencional sintonizado del mismo modo.

Realizando otra simulación, Figura 4.2.8, se prueba el esquema de control con una perturbación de la temperatura de alimentación del reactor (de 350 K a 400 K) después de 15 horas de simulación. En esta Figura queda al descubierto una respuesta del esquema NPI buena en comparación con la obtenida con el esquema PI convencional, por lo cual no se mencionaran cuáles son las ventajas dado que se evidencian a simple vista al comparar con el esquema de referencia, el esquema PI convencional.

Las simulaciones a lazo cerrado se realizan para tres valores de \mathbf{a} , Puede observarse que para valores los valores mas altos de \mathbf{a} , el comportamiento a lazo cerrado es mas lento que para \mathbf{a} cercanas a 0.1, pero esto es de esperarse ya que entre menor sea el valor de \mathbf{a} , mas se presiona la respuesta del esquema de control teniendo tiempos de control y desviaciones menores.

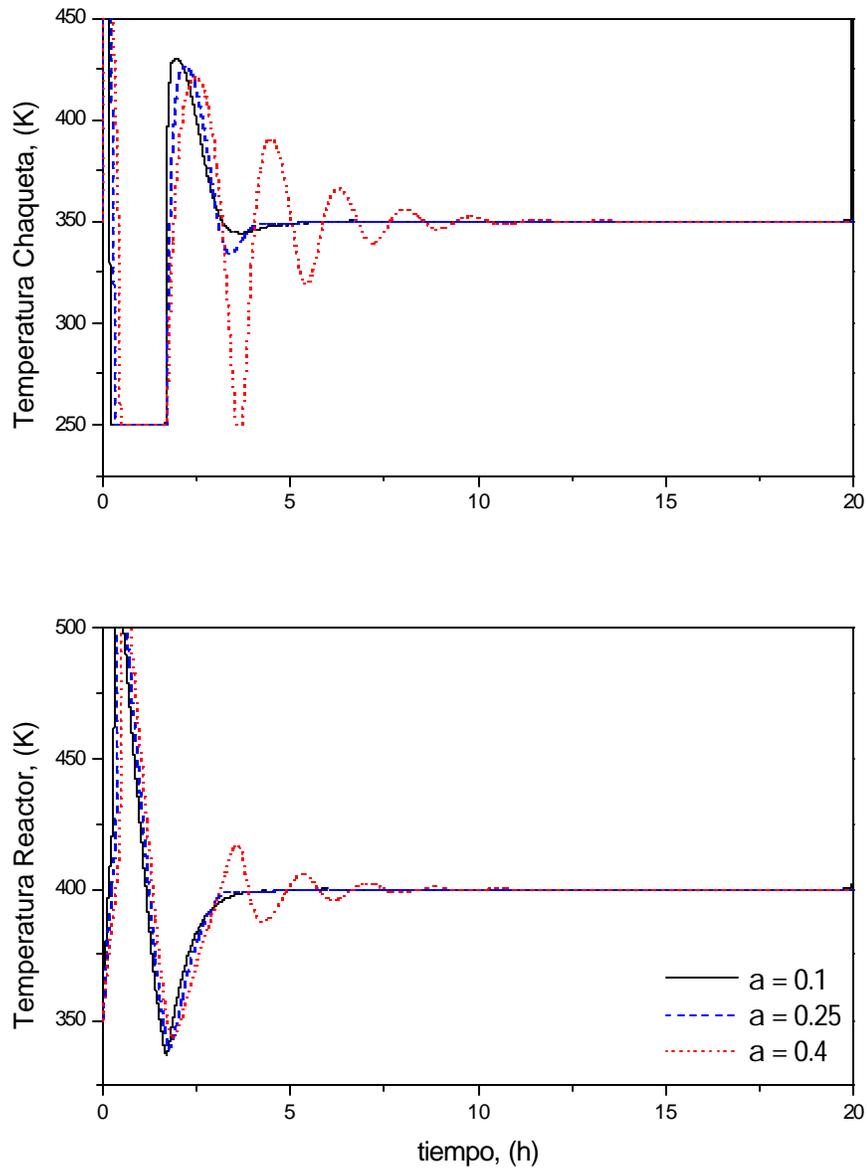


Figura 4.2.1 Reactor continuo de tanque agitado, control PI convencional, a diferentes valores de a

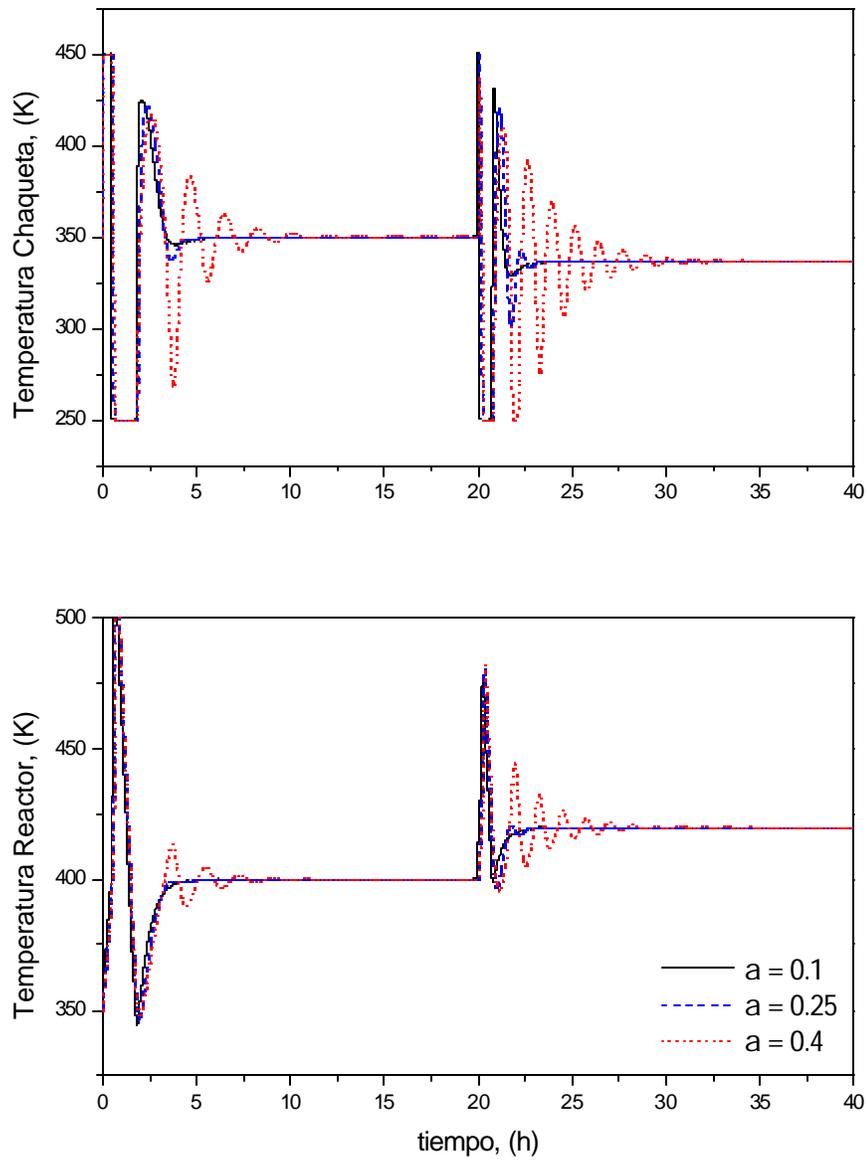


Figura 4.2.2 Reactor continuo de tanque agitado, control PI convencional, efecto del cambio del punto de operación

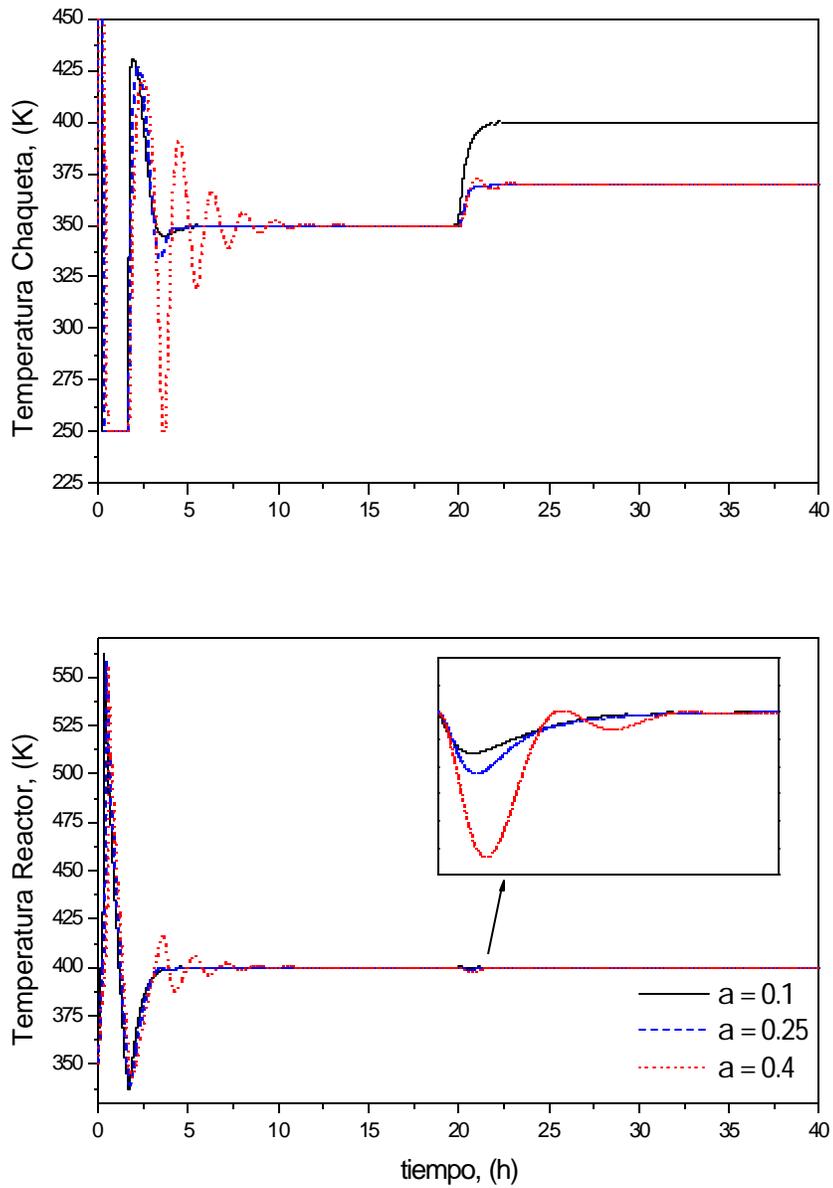


Figura 4.2.3 Reactor continuo de tanque agitado, control PI convencional, efecto de una perturbación de la concentración de alimentación al reactor

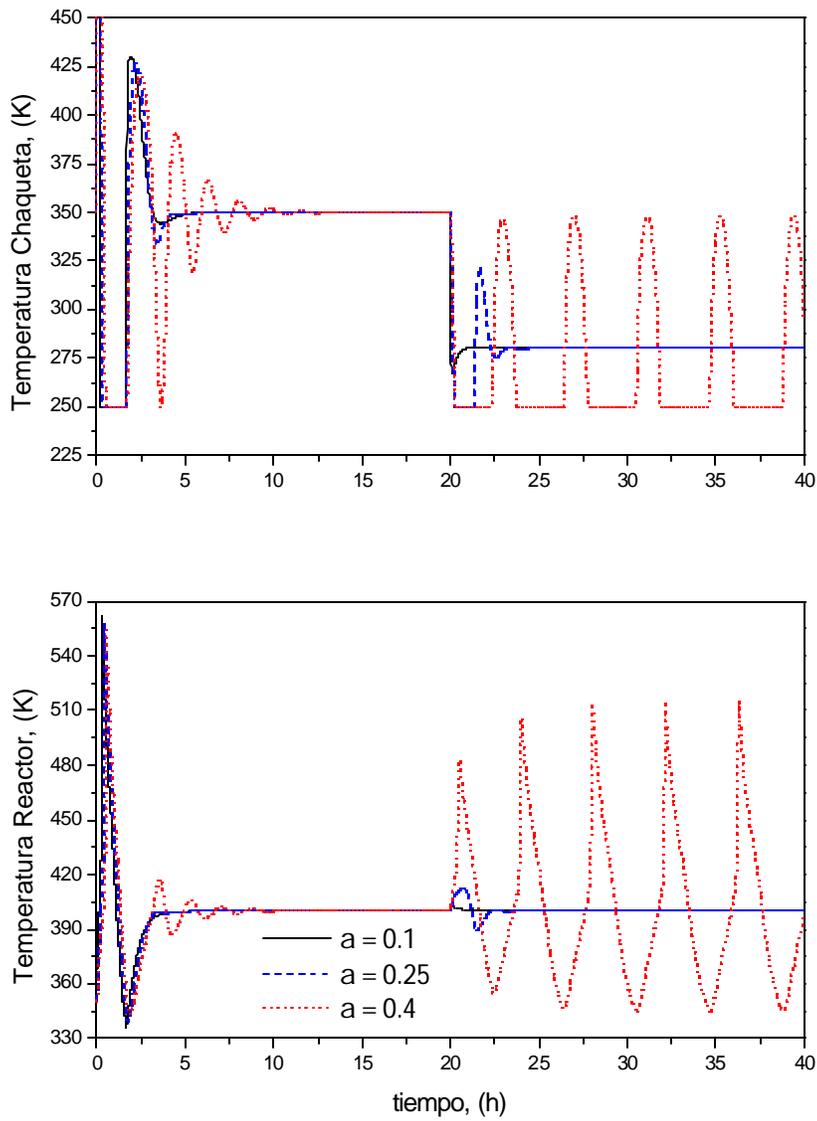


Figura 4.2.4 Reactor continuo de tanque agitado, control PI convencional, efecto de una perturbación en la temperatura de la alimentación al reactor

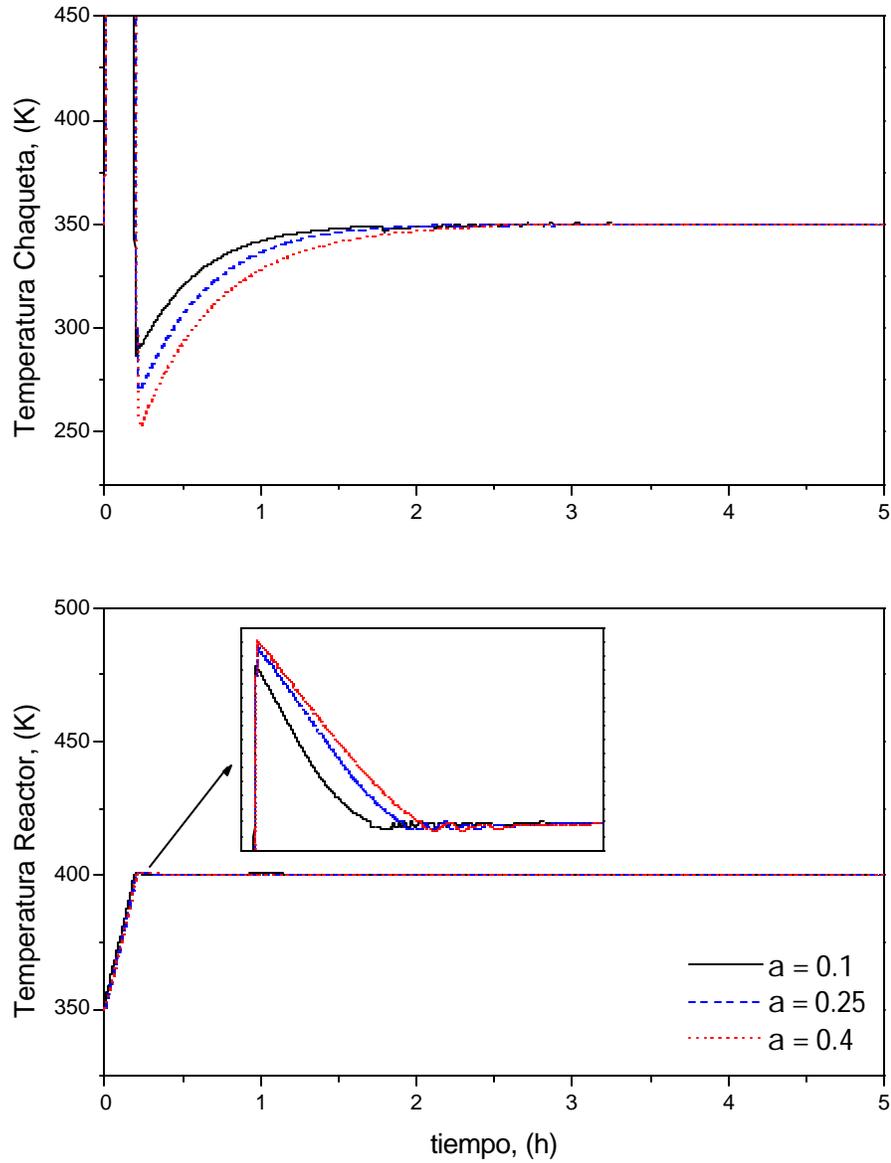


Figura 4.2.5 Reactor continuo de tanque agitado, control NPI, a diferentes valores de a

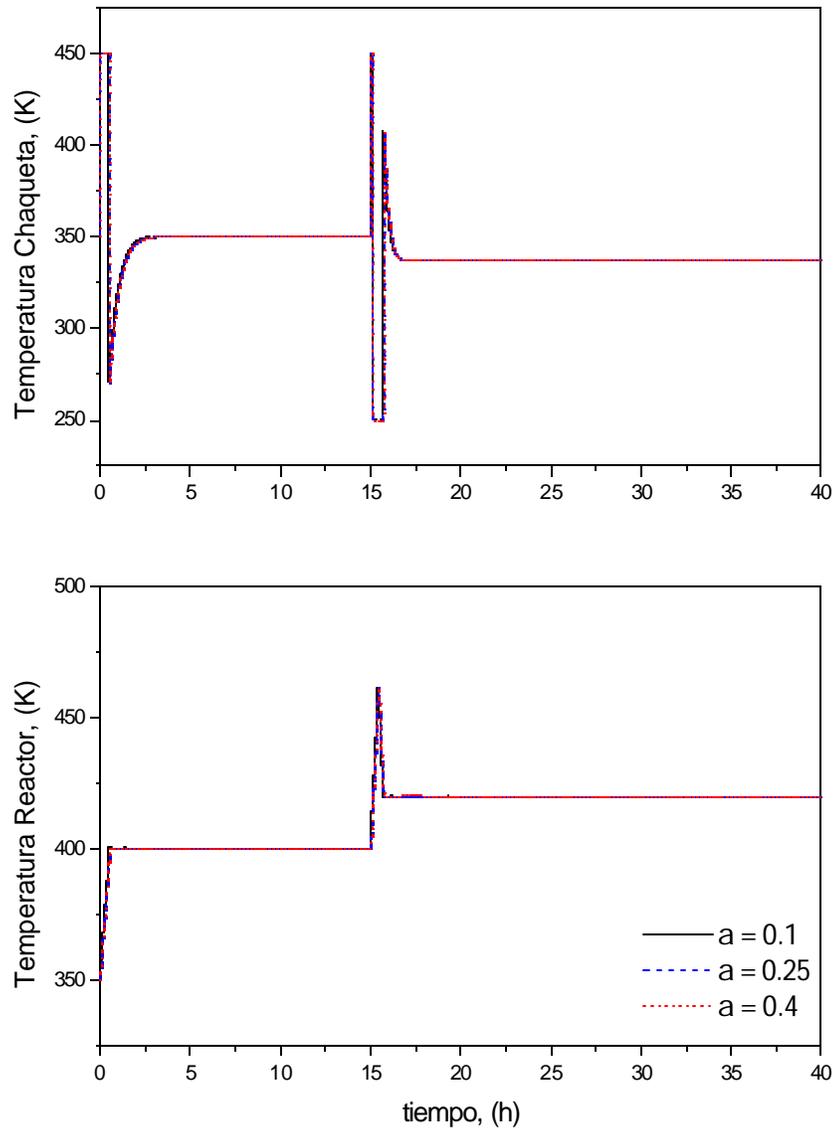


Figura 4.2.6 Reactor continuo de tanque agitado, control NPI, efecto del cambio del punto de operación

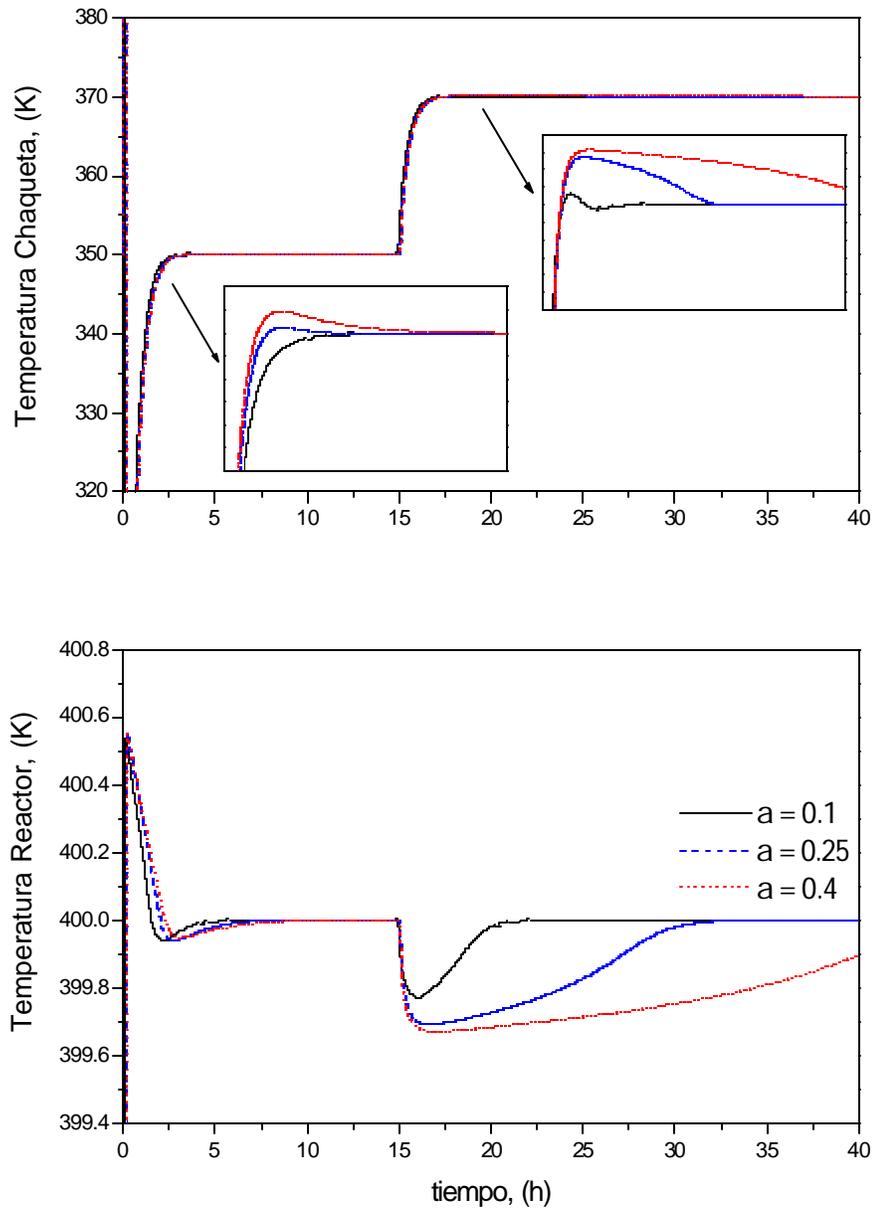


Figura 4.2.7 Reactor continuo de tanque agitado, control NPI, efecto de una perturbación de la concentración de alimentación al reactor

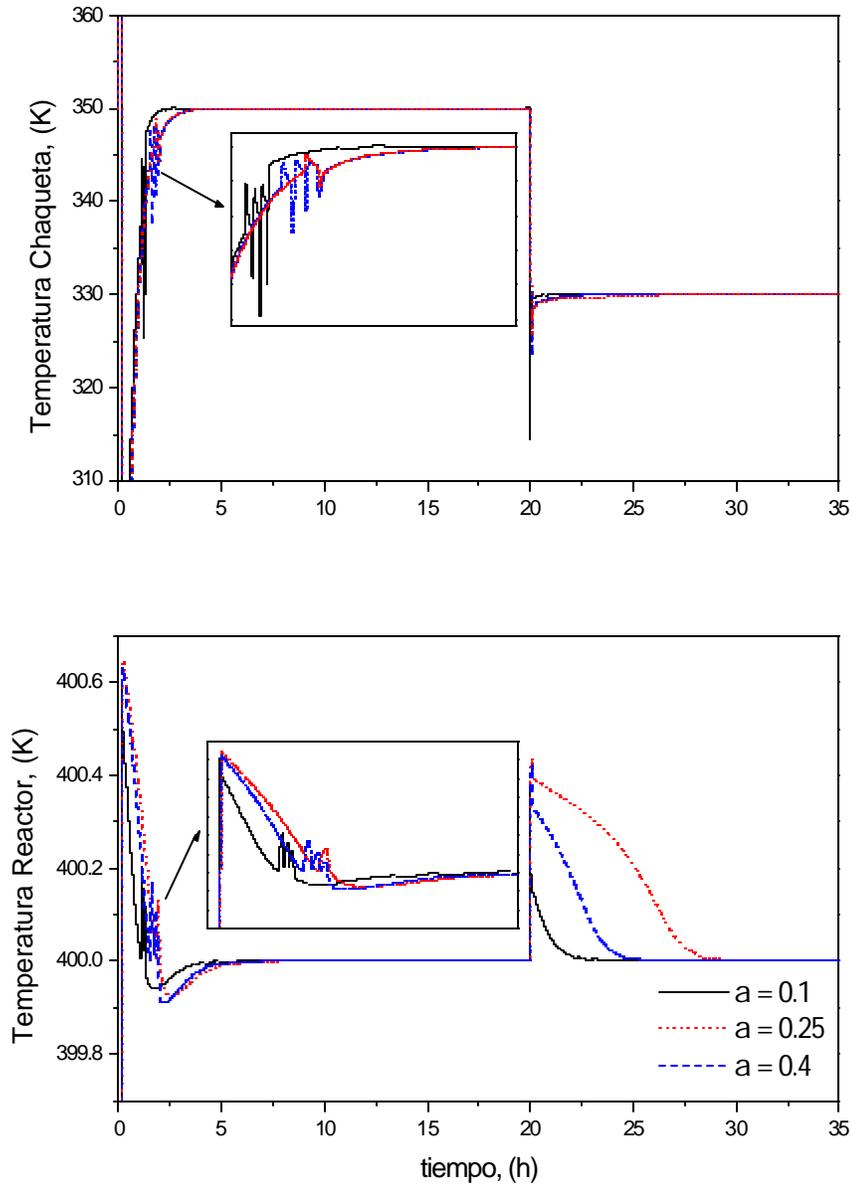


Figura 4.2.8 Reactor continuo de tanque agitado, control NPI, efecto de una perturbación en la temperatura de la alimentación al reactor

Las simulaciones que se realizaron para esta tesis, fueron llevadas a cabo en una computadora con procesador pentium 4 de 2.0 GHz AT/AT compatible, una memoria de 256 MB de RAM; se programo en el lenguaje Visual Fortran versión 6, y se resolvieron los sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden numéricamente utilizando el método numérico Runge Kutta de cuarto orden.

Capítulo 5

Conclusiones

En este capítulo se presentan las conclusiones a las cuales se llegaron en este trabajo de tesis, así como los futuros trabajos que de esta tesis se pueden desprender.

Por los resultados obtenidos en el capítulo de simulaciones numéricas, se puede concluir que la estructura de control no lineal utilizada en la regulación de temperatura y concentración de reactores químicos, reduce el tiempo de control, el número de oscilaciones y la desviación del punto de operación deseado, esto con respecto al esquema PI convencional. Lo anterior se puede lograr sin forzar la señal de salida del controlador, la cual es el flujo de alimentación a la chaqueta de enfriamiento, y éste está relacionado con la apertura de la válvula que regula este flujo, por lo tanto se logra regular con las ventajas mencionadas anteriormente sin forzar la válvula del flujo que alimenta la chaqueta de enfriamiento.

Una característica importante del esquema de control NPI es el hecho que en poco tiempo regula la variable a controlar en un intervalo de operación relativamente pequeño, esto a diferencia del esquema PI lineal el cual trabaja en un intervalo de operación relativamente grande.

Por lo antes discutido se puede concluir que la aportación de la presente tesis, es la regulación de reactores químicos manteniendo la variable a controlar en un intervalo de operación mucho menor que la estrategia tradicional PI.

Los trabajos que de este se desprende a futuro, son la implementación de la estructura de control utilizada en la regulación de la temperatura de un reactor continuo de tanque agitado y el estudio, así como la aplicación de esta estructura acoplada a un sistema de control en cascada.

Apéndice 1

A.1.1 Nomenclatura

Letras

A_r	Superficie del reactor, m^2
a_i	Superficie interna de la pared del reactor, m^2
a_o	Superficie externa de la pared del reactor, m^2
y_{Bz}	Fracción molar de benceno
y_{Am}	Fracción molar de anhídrido maleico
$C_{b,i}$	Concentración de la especie i en la fase burbuja, $\frac{mol}{m^3}$
$C_{e,i}$	Concentración de la especie i en la fase emulsión, $\frac{mol}{m^3}$
C_{Bz}	Concentración adimensional de benceno
C_{Am}	Concentración adimensional de anhídrido maleico
C_A	Concentración de la especie A, $\frac{mol}{m^3}$
Cp_c	Capacidad calorífica del aire de enfriamiento, $\frac{J}{mol}$
Cp_{cat}	Capacidad calorífica del catalizador, $\frac{J}{mol}$
Cp_g	Capacidad calorífica del gas en el reactor, $\frac{J}{mol}$
Cp_w	Capacidad calorífica de la pared del reactor, $\frac{J}{mol}$
E_i	Energía de activación de la especie i , $\frac{J}{mol}$
E_n	Energía de activación promedio, $\frac{J}{mol}$
F	Flujo adimensional de alimentación a la chaqueta

F_r	Flujo volumétrico del reactor, $\frac{m^3}{s}$
F_c	Flujo volumétrico que atraviesa a la chaqueta, $\frac{m^3}{s}$
F_{be}	Coefficiente de transferencia de masa entre la fase burbuja y la emulsión, s^{-1}
k_i	Constante de Arrhenius para la reacción i , s^{-1}
M_{cat}	Masa del catalizador, kg
M_w	Masa de la pared del reactor, kg
T	Temperatura adimensional del Reactor
T_f	Temperatura adimensional del flujo de alimentación al reactor
T_w	Temperatura adimensional de la pared del reactor
T_{jf}	Temperatura adimensional del flujo de alimentación a la chaqueta
u_b	Velocidad de la burbuja, $\frac{m}{s}$
u_{mf}	Velocidad mínima para la fluidización, $\frac{m}{s}$
V	Volumen del reactor, m^3
V_e	Volumen de la fase emulsión, m^3
H_i	Entalpía de reacción para la reacción i
$R(s)$	Transformada de Laplace de la señal del punto de control
$G_c(s)$	Función de transferencia del controlador
$G(s)$	Función de transferencia del proceso
$M(s)$	Transformada de Laplace de la señal de salida del controlador
$C(s)$	Transformada de Laplace de la señal de salida del transmisor
Z	Altura del lecho, m

Letras Griegas:

\mathbf{a}	Parámetro de ajuste
$\mathbf{a}_j \in \mathfrak{R}^j$	Vector de los coeficientes estequiométricos de la reacción
$\mathbf{b}_m, \mathbf{b}_i$	Parámetros del modelo de orden reducido
\mathbf{e}_b	Fracción del volumen del lecho ocupado por burbujas
\mathbf{l}	Fracción de Q que se adhiere a la pared del reactor
\mathbf{r}_g	Densidad de la fase gas (benceno, anhídrido maleico y óxidos de carbono)
\mathbf{r}_c	Densidad del aire que se usa para el enfriamiento en la chaqueta

A.1.2 Definiciones*Puntos de Equilibrio*

En este trabajo como en otras referencias, se considera un punto de equilibrio al estado en que el sistema ya no varía con el tiempo; en otras palabras, cuando las derivadas temporales de las variables del sistema toman el valor de cero. Para poder encontrar los puntos de equilibrio de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden, se puede recurrir a diferentes métodos, el más sencillo y práctico es el método gráfico, pero éste se limita a sistemas de 3 variables; otra forma de encontrar los puntos de equilibrio de un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden es resolviendo algebraicamente el sistema, pero esto no es siempre posible.

Estabilidad de un punto de equilibrio

Se dice que un punto de equilibrio es estable si todas las soluciones que comienzan en los puntos próximos permanecen cerca; de otra forma, es inestable.

En otras palabras un punto de equilibrio dado $x=0$ es estable si para cada $\mathbf{e} > 0$, hay $\mathbf{d} = \mathbf{d}(\mathbf{e}) > 0$ tal que: $\|x(0)\| < \mathbf{d} \Rightarrow \|x(t)\| < \mathbf{e}, \quad \forall t \geq 0$

Estabilidad asintótica de un punto de equilibrio

Se dice que un punto de equilibrio es asintóticamente estable si todas las soluciones que comienzan en los puntos próximos no solo permanecen cerca, sino que también tienden al punto de equilibrio cuando el tiempo se aproxima a infinito.

Esto quiere decir que un punto de equilibrio dado $x=0$ es asintóticamente estable si para cada $\mathbf{e} > 0$, hay $\mathbf{d} = \mathbf{d}(\mathbf{e}) > 0$ tal que: $\|x(0)\| < \mathbf{d} \Rightarrow \|x(t)\| < \mathbf{e}, \quad \forall t \geq 0$ y \mathbf{d} puede ser elegido tal que: $\|x(0)\| < \mathbf{d} \Rightarrow \lim_{t \rightarrow \infty} x(t) = 0$

Dinámica a lazo abierto

Un sistema se dice que está a lazo abierto cuando no está siendo regulado; es decir cuando no es afectado por un esquema de control, aquí la variable a manipular es constante.

Tiempo Muerto

El tiempo muerto es el tiempo que tarda en verse afectada una o varias variables del sistema por una perturbación en el sistema.

Apéndice 2

A.2.1 Método de sintonizado por respuesta al escalón

El sintonizado de las ganancias del proceso se lleva a cabo por una respuesta al escalón, esto es por perturbación de la variable manipulada de $\pm 5.0\%$, de forma tal que se pueda medir el cambio en la variable a controlar, como podemos apreciar gráficamente en la Figura 2.4.1.

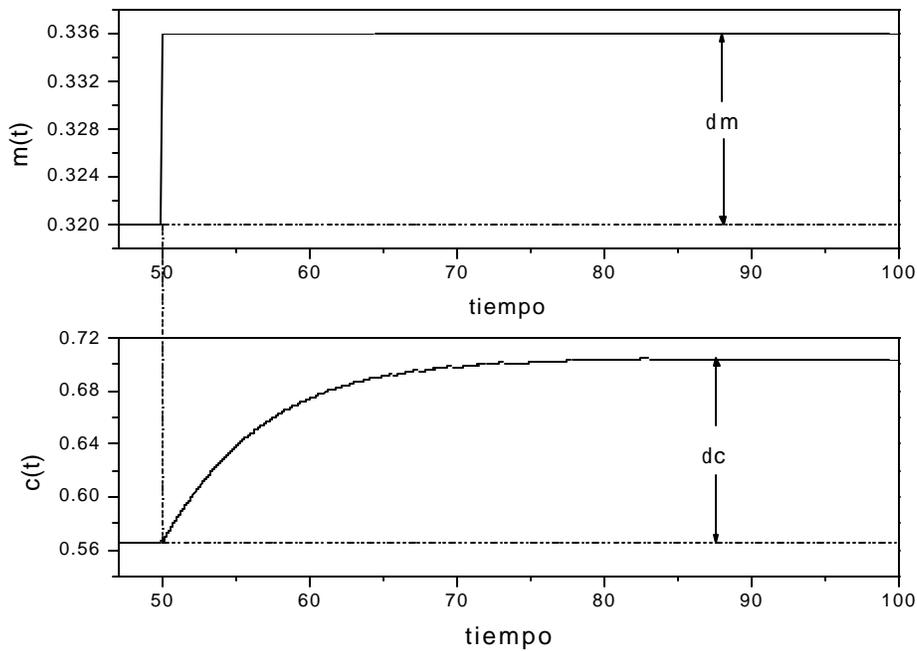


Figura A.2.1 Curva de reacción del proceso o respuesta al escalón.

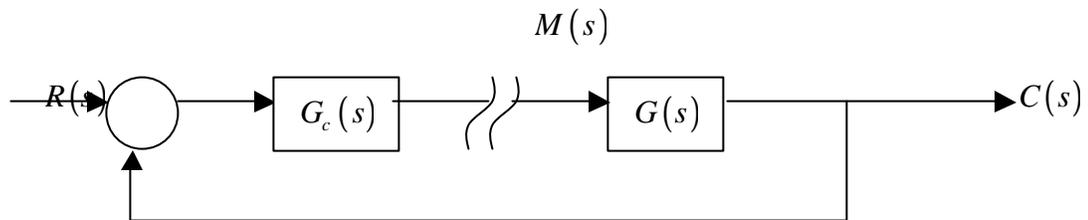


Figura A.2.2 Diagrama de bloques para la prueba escalón a circuito cerrado.

La señal de salida del proceso se expresa mediante:

$$C(s) = G(s) M(s) \quad (\text{A.2.1.1})$$

Para un cambio en escalón de magnitud $\mathbf{d}m$ en la salida del controlador y un modelo de primer orden más tiempo muerto, se tiene:

$$C(s) = \frac{ke^{-t_0s} \mathbf{d}m}{ts+1} \frac{1}{s} \quad (\text{A.2.1.2})$$

Expandiendo la ecuación anterior en fracciones parciales, se tiene:

$$C(s) = k \mathbf{d}m e^{-t_0s} \left[\frac{1}{s} - \frac{t}{ts+1} \right] \quad (\text{A.2.1.3})$$

Invirtiendo la ecuación anterior del dominio de Laplace al dominio del tiempo, obtenemos:

$$\mathbf{d}c(t) = k \mathbf{d}m u(t-t_0) \left[1 - e^{-\frac{t-t_0}{t}} \right] \quad (\text{A.2.1.4})$$

En donde: $u(t-t_0)$ es la función escalón.

El límite de $\mathbf{d}c(t)$, cuando el tiempo tiende al infinito, es:

$$\lim_{t \rightarrow \infty} \mathbf{d}c(t) = \mathbf{d}c_s = k \mathbf{d}m \quad (\text{A.2.1.5})$$

Despejando la ecuación anterior se obtiene:

$$k = \frac{\mathbf{d}c_s}{\mathbf{d}m} \quad (\text{A.2.1.6})$$

De esta forma se calcula la ganancia del proceso k .

Para calcular la constante de tiempo, decimos que $t = \mathbf{t} + t_0$ y lo sustituimos en la ecuación (2.8) y tenemos, que:

$$\mathbf{d}c(\mathbf{t} + t_0) = k \mathbf{d}m u(\mathbf{t}) [1 - e^{-1}] \quad (\text{A.2.1.7})$$

En donde: $u(\mathbf{t}) = 1$

$$\mathbf{d}c(\mathbf{t} + t_0) = k \mathbf{d}m 0.632 \quad (\text{A.2.1.8})$$

Y recordando la ecuación (2.9), decimos que:

$$\mathbf{d}c(\mathbf{t} + t_0) = 0.632 \mathbf{d}c_s \quad (\text{A.2.1.9})$$

Por lo concluido en la ecuación (2.13), podemos decir que $\mathbf{t} + t_0$ es igual al tiempo que se ocupa para llegar al 63.2 % de $\mathbf{d}c_s$; y como en el caso de nuestras simulaciones no se tiene tiempo muerto, por lo tanto la constante de tiempo en nuestro caso, será el tiempo que se ocupa para llegar al 63.2 % de $\mathbf{d}c_s$.

A.2.2 Método de sintonizado para el esquema NPI

El sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden en el espacio de estado y estrictamente invariantes en el tiempo, están dadas por:

$$\dot{x}(t) = Ax(t) + Bu(t) \quad x(0) = \mathbf{q}_n$$

$$y(t) = cx(t)$$

El esquema de control esta dado por:

$$\dot{z}(t) = \frac{e(t)}{1 + \mathbf{m}^2 e^2(t)}, \quad z(0) = 0$$

$$u(t) = k_i z(t) + \left[k_p + g_p e^{I|e(t)|} \right] e(t)$$

La entrada al controlador es:

$$e = (x_s - y)$$

El sistema a lazo cerrado en el espacio de estado esta dado por:

$$\begin{bmatrix} \dot{x}(t) \\ \dot{z}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Ax(t) + B \left[k_p + g_p e^{I|x_s - cx(t)|} \right] (x_s - cx(t)) + Bk_i z(t) \\ \frac{(x_s - cx(t))}{1 + \mathbf{m}^2 (x_s - cx(t))^2} \end{bmatrix} \quad (\text{A.2.2.1})$$

para todo $t \geq 0$, con las condiciones iniciales $x(0) = \mathbf{q}_n$ y $z(0) = 0$

Los puntos de equilibrio para un sistema dado están dados por $(x_e, z_e) \in \mathfrak{R}^n \times \mathfrak{R}$. Y claramente x_e satisface $cx_e = x_s$ bajo nuestra definición de la salida del proceso.

El sistema linealizado a lazo cerrado esta dado por:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{d}\dot{x}(t) \\ \mathbf{d}\dot{z}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A+B[k_p + g_p]c + Bk_i \\ -c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{d}x(t) \\ \mathbf{d}z(t) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} B[k_p + g_p] \\ 1 \end{bmatrix} x_s \quad (\text{A.2.2.2})$$

para todo $t \geq 0$, en donde $\mathbf{d}x(t) = x(t) - x_e$ y $\mathbf{d}z(t) = z(t) - z_e$.

Es bien sabido que en las vecindades del punto de equilibrio, la estabilidad del sistema a lazo cerrado linealizado implica la estabilidad exponencial del sistema. Tal que la estabilidad del sistema linealizado es determinada por valores propios de la matriz asociada.

$$A_c = \begin{bmatrix} A+B[k_p + g_p]c + Bk_i \\ -c \end{bmatrix} \quad (\text{A.2.2.3})$$

Nótese que los valores propios de A_c están dados por:

$$\mathbf{I}_i(A_c) = \text{Re}(\mathbf{I}_i(A_c)) + j\text{Im}(\mathbf{I}_i(A_c)) \quad i = 1, 2, 3, \dots, n+1 \quad (\text{A.2.2.4})$$

Con estos pasos se puede convertir el problema de la determinación de los parámetros k_p , k_i , g_p , \mathbf{l} y \mathbf{m} en un problema de optimización.

A.2.3 Internal Model Control (IMC)

Para comenzar con el manejo matemático del IMC, se plantea el esquema de control proporcional, el cual es el siguiente:

$$u = \bar{u} + k_p e(t) \quad (\text{A.2.3.1})$$

En donde:

u es el valor numérico de la variable a manipular (la salida del controlador)

\bar{u} es un valor de referencia de la salida del controlador, cuando el sistema se estaciono

k_p es el valor de la ganancia proporcional

$e(t)$ es el error relativo al punto de operación deseado

Suponiendo que el valor de referencia de la salida del controlador es cero y manipulando algebraicamente se obtiene:

$$\frac{u}{e} = k_p \quad (\text{A.2.3.2})$$

Suponiendo un sistema de primer orden, ya que los casos de estudio son sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden, un modelo general sería, el siguiente:

$$t_0 \frac{de}{dt} + e = k_{pr} u \quad (\text{A.2.3.3})$$

Y como el objetivo de control es que el sistema se estacione cuando el error sea igual a cero y por lo tanto que la salida del controlador sea la salida de referencia, entonces, se desea que el sistema de primer orden sea igual al siguiente:

$$t_c \frac{de}{dt} + e = 0 \quad (\text{A.2.3.4})$$

Acoplando las ecuaciones (A.2.3.3) y (A.2.3.4), se obtiene:

$$-\frac{t_0}{t_c} e + e = k_{pr} u \quad (\text{A.2.3.5})$$

Manipulando algebraicamente la ecuación (A.2.3.5), se llega a la siguiente relación:

$$\frac{u}{e} = k_{pr}^{-1} \left[1 - \frac{t_0}{t_c} \right] \quad (\text{A.2.3.6})$$

Acoplando las ecuaciones (A.2.3.2) y (A.2.3.6), se obtiene:

$$k_p = -k_{pr}^{-1} \left[\frac{t_0}{t_c} - 1 \right] \quad (\text{A.2.3.7})$$

Como ambos t son constantes y $t_0 > t_c$, entonces podemos suponer la siguiente relación:

$$t_c = a t_0 \quad (\text{A.2.3.8})$$

En la que $0 < \mathbf{a} < 1$ y de esta forma la ecuación (A.2.3.7) se puede presentar de la siguiente manera:

$$k_p = -k_{pr}^{-1} \left[\frac{1}{\mathbf{a}} - 1 \right] \quad (\text{A.2.3.9})$$

A.2.4 Cálculo de puntos de equilibrio

Para calcular los puntos de equilibrio del caso de estudio 1 (el FBR) se procede a realizar una reducción algebraica del sistema de ecuaciones cuando las derivadas temporales de las variables de estado se consideran igual a cero, para reducir el modelo de 4x4 a uno de 2x2 y de esa forma graficar y poder apreciar visualmente los puntos de equilibrio.

El sistema de ecuaciones al cual se le buscan sus puntos de equilibrio es:

$$\dot{C}_{Bz} = \mathbf{q}_C (C_{Bz}^{in} - C_{Bz}) - \mathbf{a}_C [k_1 \mathbf{x}_1(T) + k_3 \mathbf{x}_3(T)] C_{Bz} \quad (\text{A.2.4.1})$$

$$\dot{C}_{AM} = \mathbf{q}_C (C_{AM}^{in} - C_{AM}) + \mathbf{a}_C [k_1 \mathbf{x}_1(T) C_{Bz} - k_2 \mathbf{x}_2(T) C_{AM}] \quad (\text{A.2.4.2})$$

$$\dot{T} = \mathbf{q}_T (T^{in} - T) + \mathbf{g} (T_c - T) + \mathbf{a}_T [H_1 k_1 \mathbf{x}_1(T) C_{Bz} + H_2 k_2 \mathbf{x}_2(T) C_{AM} + H_3 k_3 \mathbf{x}_3(T) C_{Bz}] \quad (\text{A.2.4.3})$$

$$\dot{T}_c = F \mathbf{q}_F (T_c^{in} - T_c) + \mathbf{d} \mathbf{g} (T - T_c) + \mathbf{f} \quad (\text{A.2.4.4})$$

En el equilibrio, $\dot{C}_{Bz} = 0$, $\dot{C}_{AM} = 0$, $\dot{T} = 0$ y $\dot{T}_c = 0$, entonces:

$$0 = \mathbf{q}_C (C_{Bz}^{in} - C_{Bz}) - \mathbf{a}_C [k_1 \mathbf{x}_1(T) + k_3 \mathbf{x}_3(T)] C_{Bz} \quad (\text{A.2.4.5})$$

$$0 = \mathbf{q}_C (C_{AM}^{in} - C_{AM}) + \mathbf{a}_C [k_1 \mathbf{x}_1(T) C_{Bz} - k_2 \mathbf{x}_2(T) C_{AM}] \quad (\text{A.2.4.6})$$

$$0 = \mathbf{q}_T (T^{in} - T) + \mathbf{g} (T_c - T) + \mathbf{a}_T [H_1 k_1 \mathbf{x}_1(T) C_{Bz} + H_2 k_2 \mathbf{x}_2(T) C_{AM} + H_3 k_3 \mathbf{x}_3(T) C_{Bz}] \quad (\text{A.2.4.7})$$

$$0 = F \mathbf{q}_F (T_c^{in} - T_c) + \mathbf{d} \mathbf{g} (T - T_c) + \mathbf{f} \quad (\text{A.2.4.8})$$

En donde $C_{Bz}^{in} = 1$, $C_{AM}^{in} = 0$, $T^{in} = 0$ y $T_c^{in} = -9.97$

Reordenando algebraicamente las ecuaciones (A.2.4.5), (A.2.4.6), (A.2.4.7) y (A.2.4.8), se tiene:

$$C_{Bz} = \frac{\mathbf{q}_c}{\mathbf{q}_c + \mathbf{a}_c (k_1 \mathbf{x}_1(T) + k_3 \mathbf{x}_3(T))} \quad (\text{A.2.4.9})$$

$$C_{AM} = \frac{\mathbf{a}_c k_1 \mathbf{x}_1(T)}{\mathbf{q}_c + \mathbf{a}_c k_2 \mathbf{x}_2(T)} C_{Bz} \quad (\text{A.2.4.10})$$

$$T_c = \left(\frac{\mathbf{q}_T}{\mathbf{g}} + 1 \right) T - \frac{\mathbf{a}_T}{\mathbf{g}} (H_1 k_1 \mathbf{x}_1(T) C_{Bz} + H_2 k_2 \mathbf{x}_2(T) C_{AM} + H_3 k_3 \mathbf{x}_3(T) C_{Bz}) \quad (\text{A.2.4.11})$$

$$T_c = -\frac{9.97 F \mathbf{q}_F + \mathbf{f}}{F \mathbf{q}_F + \mathbf{d} \mathbf{g}} + \frac{\mathbf{d} \mathbf{g}}{F \mathbf{q}_F + \mathbf{d} \mathbf{g}} T \quad (\text{A.2.4.12})$$

Sustituyendo las concentraciones de benceno y de anhídrido maleico en la ecuación (A.2.4.11), se obtiene:

$$T_c = \left(\frac{\mathbf{q}_T}{\mathbf{g}} + 1 \right) T - \frac{\mathbf{a}_T}{\mathbf{g}} \left(H_1 k_1 \mathbf{x}_1(T) + \frac{H_2 k_2 \mathbf{x}_2(T) \mathbf{a}_c k_1 \mathbf{x}_1(T)}{\mathbf{q}_c + \mathbf{a}_c k_2 \mathbf{x}_2(T)} + H_3 k_3 \mathbf{x}_3(T) \right) \frac{\mathbf{q}_c}{\mathbf{q}_c + \mathbf{a}_c (k_1 \mathbf{x}_1(T) + k_3 \mathbf{x}_3(T))} \quad (\text{A.2.4.13})$$

Cuando graficamos la temperatura del reactor contra la temperatura de la chaqueta, de la ecuación anterior (A.2.4.13) y de la ecuación del balance de calor en la chaqueta de enfriamiento (A.2.4.12), tenemos:

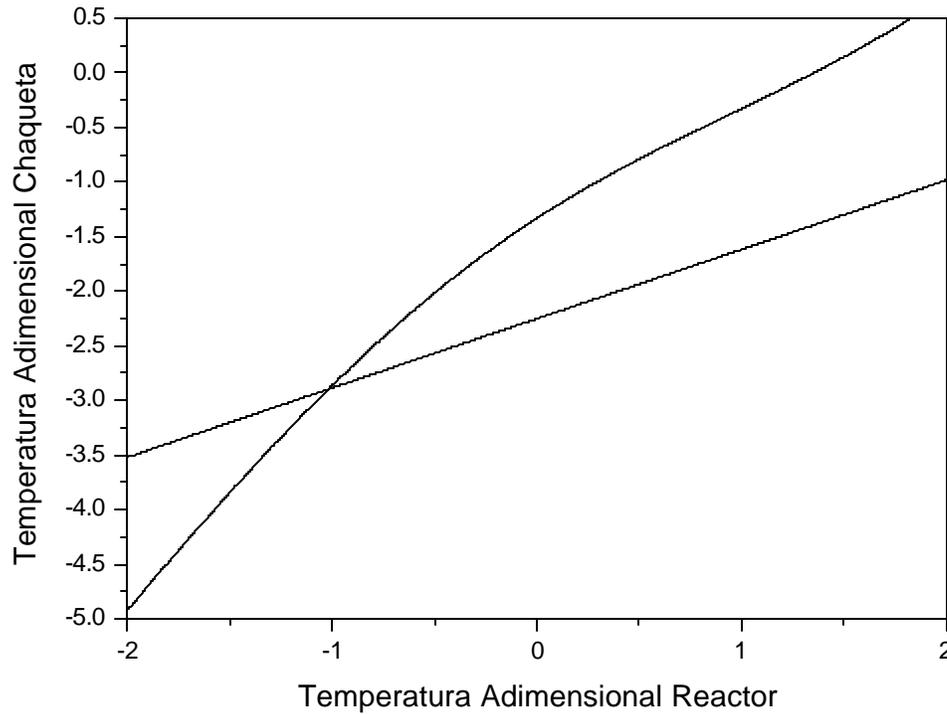


Figura A.2.3 Punto de equilibrio único del FBR, Temperatura adimensional del reactor contra Temperatura adimensional de la chaqueta.

las intersecciones de las dos graficas representan el único punto de equilibrio del reactor, y este es:

$$P_1 = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.9091 \\ 0.0615 \\ -1.015 \\ -2.8976 \end{bmatrix}_{Adimensional}$$

$$P_1 = \begin{bmatrix} C_{Bz} \\ C_{AM} \\ T \\ T_C \end{bmatrix}_{P_1} = \begin{bmatrix} 1.818 \\ 0.123 \\ 599.50 \\ 537.19 \end{bmatrix}_{Dimensional}$$

Para calcular los puntos de equilibrio del caso de estudio 2, el CSTR, sólo hay que manipular algebraicamente el sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias de primer orden cuando las derivadas temporales de las variables de estado se consideran igual a cero, y así graficar la concentración de reactivos contra la temperatura del reactor y apreciar visualmente los puntos de equilibrio.

Primero se renombran las variables:

$$\begin{bmatrix} C \\ T \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = X$$

Sustituyendo los valores de los parámetros y expresando las variables de la nueva forma, se tiene:

$$\dot{x}_1 = (1 - x_1) - x_1 e^{\frac{25 - 10000}{x_2}} \quad (\text{A.2.4.14})$$

$$\dot{x}_2 = (350 - x_2) + 200 x_1 e^{\frac{25 - 10000}{x_2}} + (350 - x_2) \quad (\text{A.2.4.15})$$

Reordenando algebraicamente, se obtiene:

$$\dot{x}_1 = 1 - x_1 \left(1 + e^{\frac{25 - 10000}{x_2}} \right) \quad (\text{A.2.4.16})$$

$$\dot{x}_2 = 200 x_1 e^{\frac{25 - 10000}{x_2}} - 2x_2 + 700 \quad (\text{A.2.4.17})$$

En el equilibrio, $\dot{x}_1 = 0$ y $\dot{x}_2 = 0$, entonces:

$$1 - x_1 \left(1 + e^{\frac{25 - 10000}{x_2}} \right) = 0 \quad (\text{A.2.4.18})$$

$$100 x_1 e^{\frac{25 - 10000}{x_2}} - x_2 + 350 = 0 \quad (\text{A.2.4.19})$$

Calculando las raíces para x_1 y x_2 , por un medio gráfico se obtiene:

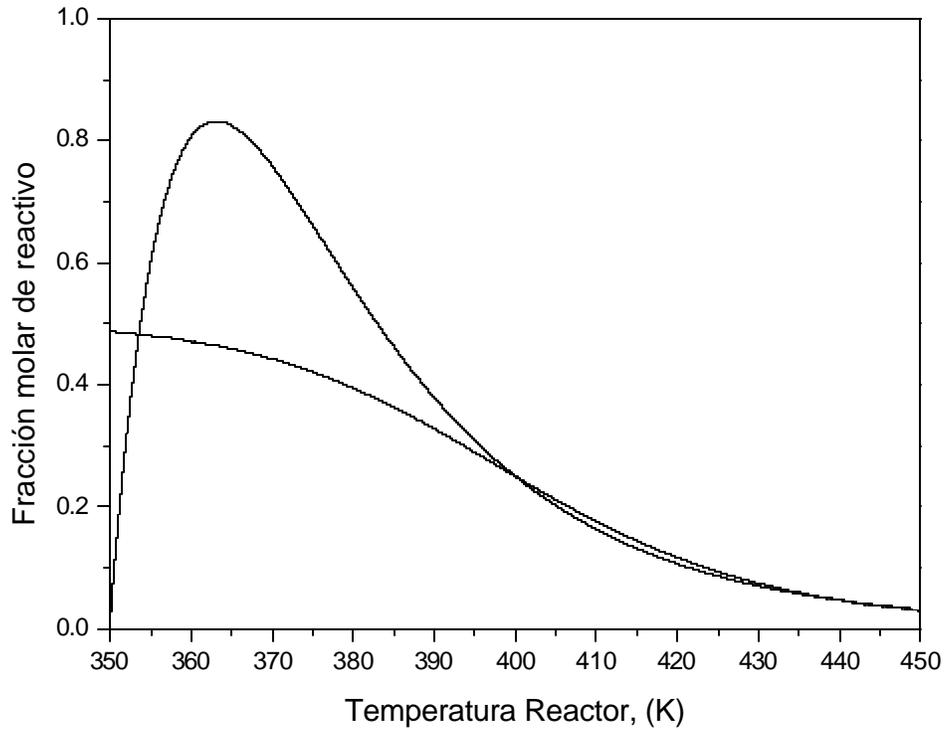


Figura A.2.4 Puntos de equilibrio del CSTR, Temperatura (K) contra Concentración (Fracción molar).

Las intersecciones de las dos graficas representan los puntos de equilibrio del reactor, y éstos son:

$$p_1 = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}_{p_1} = \begin{bmatrix} 0.96366 \\ 353.63 \end{bmatrix} \quad p_2 = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}_{p_2} = \begin{bmatrix} 0.5 \\ 400 \end{bmatrix} \quad p_3 = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}_{p_3} = \begin{bmatrix} 0.088516 \\ 441.15 \end{bmatrix}$$

A.2.5 Análisis de estabilidad

Como en el caso de estudio 1 sólo hay un punto de equilibrio y el sistema es estable, no es necesario realizar análisis de estabilidad en ese punto de equilibrio, ya que por ende se sabe que dicho punto de equilibrio es estable; el análisis de estabilidad se realiza con el fin de buscar los puntos de equilibrio inestables, ya que en ellos se dan los máximos de la tasa de reacción, y es por ende el punto idóneo de operación; por ello se realiza un análisis de la tasa de reacción para buscar el punto máximo de esta.

Para llevar a cabo el análisis de la tasa máxima de reacción, se grafica la tasa de reacción del anhídrido maleico contra el flujo de la chaqueta.

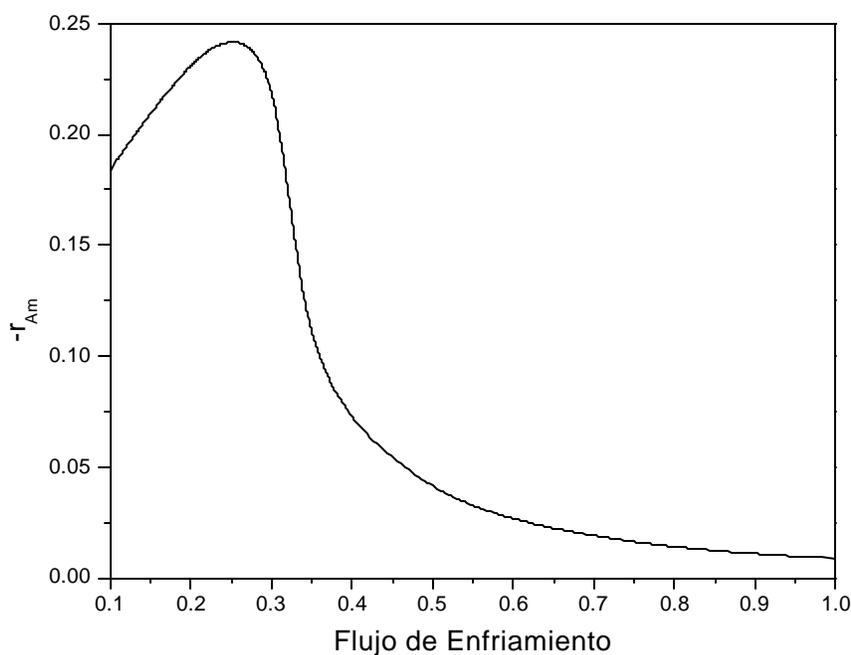


Figura A.2.5 Tasa de reacción del anhídrido maleico contra Flujo de la chaqueta de enfriamiento.

El punto máximo de la tasa de reacción del anhídrido maleico, obtenido por medio de simulaciones y claramente apreciado en la Figura A.2.5, es el siguiente:

Flujo	% _{molar} de anhídrido Maléico	Temperatura del reactor, (K)	Temperatura de la chaqueta, (K)	$-r_{Am}$
0.250	0.775	718.816	682.250	0.243

Se analiza la estabilidad de los tres puntos de equilibrio del caso de estudio 2 (el CSTR) siguiendo la siguiente metodología:

Se linealiza alrededor de los tres puntos de equilibrio, y se obtiene:

$$\dot{x}_i = \dot{x}_i|_p + \left. \frac{d\dot{x}_i}{dx_1} \right|_p (x_1 - x_{1p}) + \left. \frac{d\dot{x}_i}{dx_2} \right|_p (x_2 - x_{2p}) \quad (\text{A.2.5.1})$$

En donde: $\dot{x}_i|_p = 0$

$$\dot{x}_i = \left. \frac{d\dot{x}_i}{dx_1} \right|_p (x_1 - x_{1p}) + \left. \frac{d\dot{x}_i}{dx_2} \right|_p (x_2 - x_{2p}) \quad (\text{A.2.5.2})$$

Se propone el siguiente cambio de variable: $y_i = (x_i - x_{ip})$, entonces:

$$\dot{y}_i = \left. \frac{d\dot{x}_i}{dx_1} \right|_p (y_1) + \left. \frac{d\dot{x}_i}{dx_2} \right|_p (y_2) \quad (\text{A.2.5.3})$$

Ahora definimos la matriz Y : $Y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \end{bmatrix}$

Entonces: $\dot{Y} = A Y$, en donde $A = \left. \begin{bmatrix} \frac{d\dot{x}_1}{dx_1} & \frac{d\dot{x}_1}{dx_2} \\ \frac{d\dot{x}_2}{dx_1} & \frac{d\dot{x}_2}{dx_2} \end{bmatrix} \right|_p$

Pero recordando que: $X = \begin{bmatrix} y_1 + x_1|_p \\ y_2 + x_2|_p \end{bmatrix}$

Se buscaran los valores propios de la matriz A , para conocer por medio de ellos la estabilidad en los puntos de equilibrio.

Los valores propios son las raíces del siguiente polinomio cuadrático:

$$\det(A - \mathbf{I}\lambda) = 0 \quad (\text{A.2.5.4})$$

$$\det \begin{bmatrix} \frac{d\dot{x}_1}{dx_1} - \mathbf{I} & \frac{d\dot{x}_1}{dx_2} \\ \frac{d\dot{x}_2}{dx_1} & \frac{d\dot{x}_2}{dx_2} - \mathbf{I} \end{bmatrix}_p = 0$$

$$\mathbf{I}^2 - \mathbf{I} \left(\frac{d\dot{x}_1}{dx_1} + \frac{d\dot{x}_2}{dx_2} \right)_p + \left(\frac{d\dot{x}_1}{dx_1} \frac{d\dot{x}_2}{dx_2} - \frac{d\dot{x}_1}{dx_2} \frac{d\dot{x}_2}{dx_1} \right)_p = 0 \quad (\text{A.2.5.5})$$

Y los términos de la matriz A , son:

$$\frac{d\dot{x}_1}{dx_1} = - \left(1 + e^{25 - \frac{10000}{x_2}} \right) \quad (\text{A.2.5.6})$$

$$\frac{d\dot{x}_1}{dx_2} = (-10000) \frac{x_1}{x_2^2} e^{25 - \frac{10000}{x_2}} \quad (\text{A.2.5.7})$$

$$\frac{d\dot{x}_2}{dx_1} = (200) e^{25 - \frac{10000}{x_2}} \quad (\text{A.2.5.8})$$

$$\frac{d\dot{x}_2}{dx_2} = (2000000) \frac{x_1}{x_2^2} e^{25 - \frac{10000}{x_2}} - 2 \quad (\text{A.2.5.9})$$

- Para el punto p_1 :

$$\frac{d\dot{x}_1}{dx_1} = -1.037698 \quad \frac{d\dot{x}_1}{dx_2} = -0.00290494 \quad \frac{d\dot{x}_2}{dx_1} = 7.539633 \quad \frac{d\dot{x}_2}{dx_2} = -1.41901$$

$$I^2 + (2.4567)I + (1.4943) = 0$$

En donde las raíces son: $I_1 = -1.1082$ y $I_2 = -1.3485$, por lo tanto este punto es estable.

- Para el punto p_2 :

$$\frac{d\dot{x}_1}{dx_1} = -10.7058 \quad \frac{d\dot{x}_1}{dx_2} = -0.250676 \quad \frac{d\dot{x}_2}{dx_1} = 1941.16 \quad \frac{d\dot{x}_2}{dx_2} = 48.1353$$

$$I^2 - (9/4)I - (9/4) = 0$$

En donde las raíces son: $I_1 = 3.0$ y $I_2 = -0.75$, por lo tanto este punto es inestable.

- Para el punto p_3 :

$$\frac{d\dot{x}_1}{dx_1} = -11.298242 \quad \frac{d\dot{x}_1}{dx_2} = -0.0468459 \quad \frac{d\dot{x}_2}{dx_1} = 2059.648504 \quad \frac{d\dot{x}_2}{dx_2} = 7.36919$$

$$I^2 + (3.9303)I + (1.3228) = 0$$

En donde las raíces son: $I_1 = -1.96519 + 3.06049 i$ y $I_2 = -1.96519 - 3.06049 i$, por lo tanto este punto es estable.

A.2.6 Sintonizado por respuesta en escalón

Como ya se vio en la sección 2.4, para el cálculo de la ganancia del proceso se recurre a la respuesta que presenta la variable a controlar ante una perturbación en escalón de la variable a manipular (señal de salida del controlador).

Reactor de lecho fluidizado

La variable a manipular, en este caso es el valor del flujo de alimentación a la chaqueta de enfriamiento, y la variable a controlar es la concentración del anhídrido Maléico. Por lo tanto se procede a perturbar el flujo de alimentación de la chaqueta de enfriamiento cuando el sistema se encuentra estacionado y se mide el impacto en la concentración de anhídrido maleico, y el resultado se puede ver en la siguiente Figura:

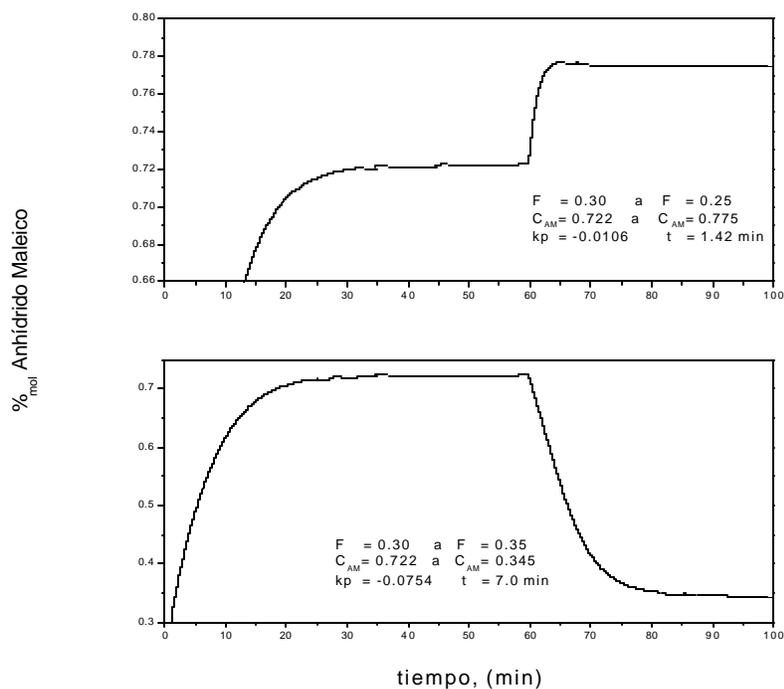


Figura A.2.6 Respuesta de la composición de anhídrido maleico a perturbaciones en escalón del flujo de alimentación a la chaqueta

Para calcular la ganancia del proceso y la constante de tiempo se procede según se expone en la sección A.2.1; es decir que la ganancia del proceso es igual a: $k_p = \frac{dc_s}{dm}$; dc_s es el incremento o decremento de la variable a controlar y dm es el incremento o decremento de la variable a manipular.

Para perturbaciones en escalón positivas o negativas del flujo de alimentación adimensional de la chaqueta de enfriamiento (variable a manipular), se logran los cambios en la concentración del anhídrido maleico que se presentan en la Figura A.2.6:

- Para un incremento en el flujo de alimentación: $k_p = \frac{(0.345 - 0.722)}{(0.30 - 0.35)} = -7.54$
- Para un decremento en el flujo de alimentación: $k_p = \frac{(0.775 - 0.722)}{(0.25 - 0.30)} = -1.06$

Y el tiempo que tarda la variable a controlar en llegar al 63.2% (ver sección 2.4) del incremento o decremento que presenta ante las perturbaciones del flujo de alimentación es:

- Para un incremento en el flujo de alimentación: $t = 420.0 \text{ s}$
- Para un decremento en el flujo de alimentación: $t = 85.2 \text{ s}$

Reactor continuo de tanque agitado

La variable a manipular, en este caso es el valor de la temperatura de la chaqueta de enfriamiento, y la variable a controlar es la temperatura del reactor; por lo tanto se procede a perturbar la temperatura de la chaqueta de enfriamiento cuando el sistema se encuentra estacionado y se mide el impacto en la temperatura del reactor y el resultado se puede ver en la Figura siguiente:

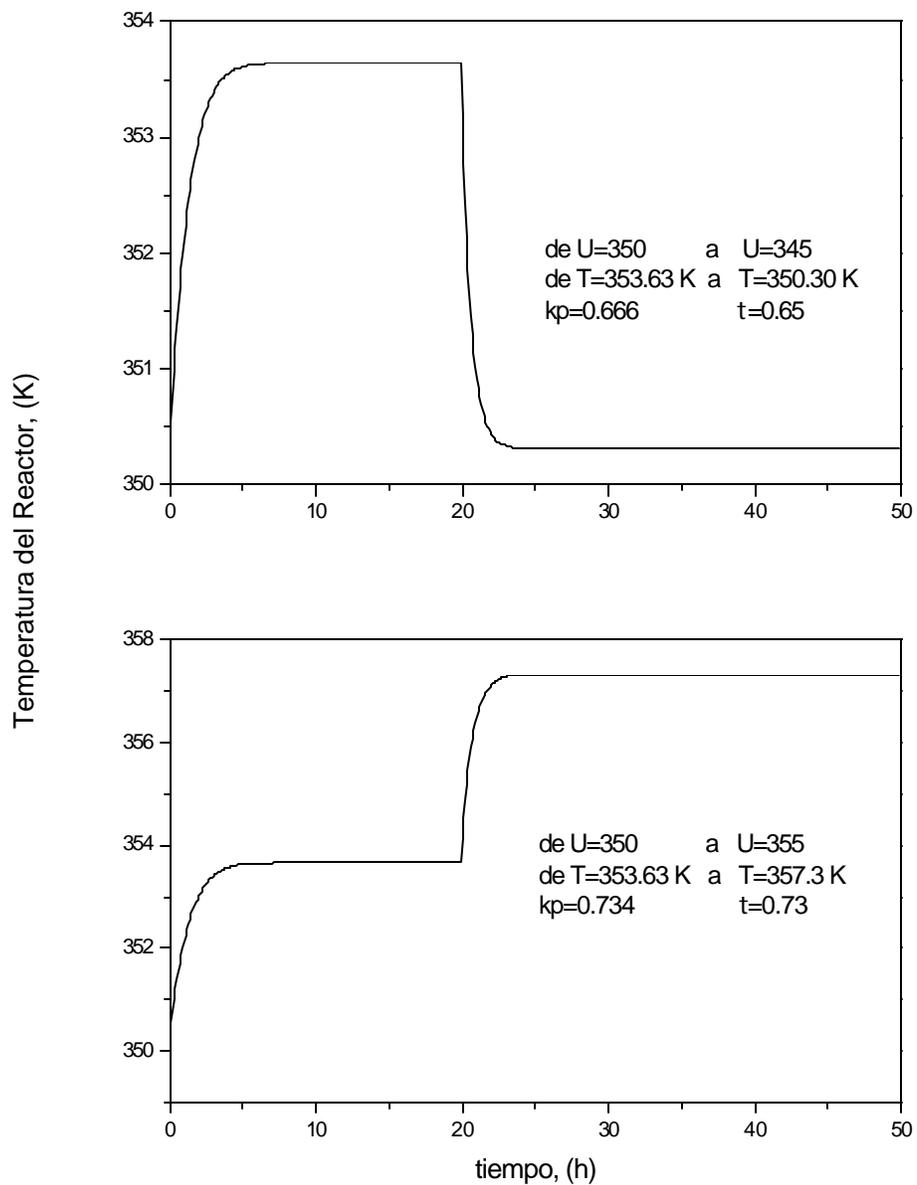


Figura A.2.7 Respuesta de la temperatura del reactor a perturbaciones en escalón de la temperatura de la chaqueta.

Para calcular la ganancia del proceso y la constante de tiempo se procede según se expone en la sección A.2.1, en donde la ganancia del proceso es igual a: $k_p = \frac{dc_s}{dm}$ y en donde dc_s es el incremento o decremento de la temperatura del reactor y dm es el incremento o decremento de la temperatura de la chaqueta.

Para perturbaciones en escalón positivas o negativas de la temperatura de la chaqueta de enfriamiento (variable a manipular), se logran los cambios en la temperatura del reactor que se presentan en la Figura A.2.7:

- Para una perturbación positiva: $k_p = \frac{(350.3 - 353.63)}{(345.0 - 350.0)} = 0.66$
- Para una perturbación negativa: $k_p = \frac{(357.3 - 353.63)}{(355.0 - 350.0)} = 0.73$

Y el tiempo que tarda la variable a controlar en llegar al 63.2% (ver sección 2.4) del incremento o decremento en la temperatura del reactor ante las perturbaciones en escalón de la temperatura de la chaqueta es:

- Para una perturbación positiva: $t = 0.65 h$
- Para una perturbación negativa: $t = 0.73 h$

Bibliografía

1. Bruns D. D. and Bailey J. E. **Process Operation Near An Unstable Steady State Using Nonlinear Feedback Control**. Chemical Engineering Science. vol. 30, No. 7, pp. 755-762, 1975.
2. Bruns D. D. and Bailey J. E. **Nonlinear Feedback Control For Operating A Nonisothermal CSTR Near An Unstable Steady State**. Chemical Engineering Science. vol. 32, pp. 257-264, 1977.
3. Cebuhar, W. A. and Costanza V. **Nonlinear Control of CSTR'S**. Chemical Engineering Science. vol. 39, No. 12, pp. 1715-1722, 1984.
4. Rugh W. J. **Design of Nonlinear PID Controllers**. American Institute of Chemical Engineering Journal. vol. 33, No. 10, pp. 1738-1742, 1987.
5. Aris, R. **Elementary Chemical Reactor Analysis**. Butterworth Publications. Stoneham, Massachusetts. 1989.
6. Alvarez Jesús, Alvarez Jaime and González E. **Global Nonlinear Control Of A Continuous Stirred Tank Reactor**. Chemical Engineering Science. vol. 44, No. 5, pp. 1147-1160, 1989.
7. Bequette, B. W. **Nonlinear Control of Chemical Processes: A Review**. Ind. Eng. Chem. Res. vol. 30, pp. 1391-1413, 1991.
8. Chien I. and Fruehauf P. S. **Consider IMC Tuning to Improve Controller Performance**. Chemical Engineering Progress. vol. 86, No. 10, 33-41, 1990.
9. Aoufoussi, H. Perrier, M. Chaouki, J. Chavarie, C. and Dochain, D. **Feedback linearizing control of a fluidized bed reactor**. Canadian Journal of Chemical Engineering, vol. 70, pp. 356-367, 1992.
10. Aris, R. **Mathematical Modelling Techniques**. Dover Publications. New York. 1994.
11. Shahruz, S. M. and Schwartz, A. L. **Design and Optimal Tuning of Nonlinear PI Compensators**. Journal of Optimization Theory and Applications, vol. 83, No. 1, pp. 181-198, 1994.
12. Smith, C. A. y Corripio, A. B. **Control Automático de Procesos**. Ed. Limusa. Primera Reimpresión. México, DF. 1994.

13. Xu, Y. Hollerbach, J. M. and Ma, D. **A Nonlinear PD Controller for Force and Contact Transient Control**. IEEE Control Systems Magazine, 15-21, 1995.
14. Khalil, H. K. **Nonlinear Systems**. Prentice Hall. Segunda Edición. Upper Saddle River, New Jersey. 1996.
15. Álvarez, R. J. Morales, A. and Cervantes, I. **Robust Proportional Integral Control**. Ind. Eng. Chem. Res., vol. 37, pp. 4740-4747, 1998.
16. Fogler H. S. Elements of Chemical Reaction Engineering. Prentice Hall. Tercera Edición. Upper Saddle River, New Jersey. 1999.
17. Armstrong B. Neevel D. and Kusik T. **New Result in NPID Control: Tracking, Integral Control, Friction Compensation, and Experimental Results**. IEEE Transactions on Control Systems Technology, vol. 9, No. 2, pp. 399-406, 2001.
18. Nikolaou, M. and Misra, P. **Linear Control of Nonlinear Processes: Recent Developments and Future Directions**. 2nd Pan American Workshop on Process Systems Engineering, 2001.
19. Álvarez, R. J. Valencia, J. and Morales, A. **Composition Cascade Control for Chemical Reactors**. International Journal of Robust and Nonlinear Control. vol. 12, pp. 1145-1171, 2002.